

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки Физика

Отделение экспериментальной физики

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

Тема работы
Анализ спектра высокого разрешения молекулы HD^{34}S в полос $\nu_2 + \nu_3$, $2\nu_1$

УДК 539.194:661.93:504.064

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ81	Чжоу Синьтун		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШ ФВП	Бехтерева Е.С.	д.ф.-м.н.		

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Кащук И.В.	к.т.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ЭБЖ	Сечин А.А.	к.т.н.		

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
ИЯТШ ОЭФ	Лидер А.М.	к. ф.-м. н.		

Томск – 2020 г.

Планируемые результаты освоения

Код	Результат обучения	Требования ФГОС ВО, СУОС, критериев АИОР, и/или заинтересованных сторон
Общие по направлению подготовки (специальности)		
P1	Понимает необходимость самостоятельного обучения и повышения квалификации в течение всего периода профессиональной деятельности.	Требования ФГОС ВО (ОПК-1,ОПК-4), СУОС ТПУ (УК-5,УК- 6), Критерий 5 АИОР (п. 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P2	Способен эффективно работать самостоятельно в качестве члена команды по междисциплинарной тематике, быть лидером в команде, консультировать по вопросам проектирования научных исследований, а также быть готовым к педагогической деятельности.	Требования ФГОС ВО (ОПК-1, ОПК-2,ОПК-7, ПК-1, ПК- 6), СУОС ТПУ (УК -3), <i>CDIO Syllabus</i> (4.7), Критерий 5 АИОР (п. 2.4), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i> ,
P3	Способен находить зарубежных и отечественных партнеров, владеет иностранным языком, позволяющим работать с зарубежными партнерами с учетом культурных, языковых и социально-экономических условий.	Требования ФГОС ВО (ОПК- 1, ОПК- 2 ,ОПК-7), СУОС ТПУ (УК-3,УК- 4, УК- 5), <i>CDIO Syllabus</i> (2.4, 3.3), Критерий 5 АИОР (п. 2.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i> ,
P4	Проявляет понимание используемых методов, области их применения, вопросов безопасности и здравоохранения, юридических аспектов, ответственности за профессиональную деятельность и ее влияния на окружающую среду.	Требования ФГОС ВО (ОПК-1, ОПК -2), СУОС ТПУ (УК-5,УК- 6), <i>CDIO Syllabus</i> (4.1), Критерий 5 АИОР (п. 2.4), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P5	Способен обрабатывать, анализировать и обобщать научно-техническую информацию, передовой отечественный и зарубежный опыт в профессиональной деятельности, осуществлять презентацию научной деятельности.	Требования ФГОС ВО (ОПК- 5, ОПК- 6 , ПК-1, ПК-2, ПК-4, ПК-5, ПК-7), СУОС ТПУ (УК- 4, УК- 5, УК- 6), <i>CDIO Syllabus</i> (2.1, 2.3, 2.4), Критерий 5 АИОР (п. 4.1, 2.2., 2.6), согласованный с требованиями международных

		стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P6	Способен планировать проведение аналитических имитационных исследований по профессиональной деятельности с применением современных достижений науки и техники, передового отечественного и зарубежного опыта в области научных исследований, умеет критически оценивать полученные теоретические и экспериментальные данные и делает выводы, знает правовые основы в области интеллектуальной собственности.	Требования ФГОС ВО (ОПК-7, ПК-2, ПК-3, ПК-4, ПК-7), СУОС ТПУ (УК- 2, УК- 6), <i>CDIO Syllabus</i> (2.4), Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 1.4, 1.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P7	Способен применять полученные знания для решения нечетко определенных задач, в нестандартных ситуациях, использует творческий подход для разработки новых оригинальных идей и методов исследования в области физики металлов, материаловедения и термообработки.	Требования ФГОС ВО (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6, ПК-2, ПК-5), СУОС ТПУ (УК- 1, УК- 4), <i>CDIO Syllabus</i> (2.1, 2.2, 2.3, 2.4), Критерий 5 АИОР (п. 1.1, 1.2, 1.3, 1.5, 1.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>
P8	Способен планировать и проводить фундаментальные исследования в проектах в области ядерно-физических исследований, взаимодействия излучения с веществом, а также модернизация современных и создание методов изучения механических, электрических, магнитных, тепловых свойств твердых тел и критически оценивать полученные результаты	Требования ФГОС ВО (ОПК-3, ОПК- 5, ОПК- 6, ОПК- 7, ПК-2, ПК-3), СУОС ТПУ (УК- 1, УК- 2), <i>CDIO Syllabus</i> (4.4), Критерий 5 АИОР (п. 1.1., 1.2, 1.4, 1.6), согласованный с требованиями международных стандартов <i>EUR-ACE</i> и <i>FEANI</i>

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:

Руководитель ООП

_____ Лидер А.М.

(Подпись)

(Дата)

(Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ

на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Магистерская диссертация

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ81	Чжоу Синьтун

Тема работы:

Анализ спектра высокого разрешения молекулы HD^{34}S в полос $\nu_2+\nu_3$, $2\nu_1$

Утверждена приказом директора (дата, номер)

30.01.2020 г., №30-9/с

Срок сдачи студентом выполненной работы:

08.06.2020 г.

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования;</i></p> <p><i>производительность или нагрузка; режим работы</i></p> <p><i>(непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид</i></p> <p><i>сырья или материал изделия; требования к продукту,</i></p> <p><i>изделию или процессу; особые требования к особенностям</i></p> <p><i>функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в</i></p> <p><i>плане безопасности эксплуатации, влияния на</i></p> <p><i>окружающую среду, энергозатратам; экономический</i></p> <p><i>анализ и т. д.).</i></p>	<p>Объектом исследования являются материнская молекула сероводорода.</p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с</i></p> <p><i>целью выяснения достижений мировой науки техники в</i></p> <p><i>рассматриваемой области; постановка задачи</i></p> <p><i>исследования, проектирования, конструирования;</i></p> <p><i>содержание процедуры исследования, проектирования,</i></p> <p><i>конструирования; обсуждение результатов выполненной</i></p> <p><i>работы; наименование дополнительных разделов,</i></p> <p><i>подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<p>Обзор литературы по спектроскопическим параметрам молекулы HDS.</p> <p>Интерпретация спектра молекулы HDS. Решение обратной задачи и получение спектроскопических постоянных.</p> <p>Раздел «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»</p> <p>Раздел «Социальная ответственность»</p>
<p>Перечень графического материала</p> <p><i>(с точным указанием обязательных чертежей)</i></p>	
<p>Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы</p> <p><i>(с указанием разделов)</i></p>	

Раздел	Консультант
Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	Кащук И.В.
Социальная ответственность	Сечин А.А.
Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:	

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШ ФВП	Бехтерева Е.С.	д.ф.-м.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ81	Чжоу Синьтун		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ81	Чжоу Синьтун

Школа	ИЯТШ	Отделение	Экспериментальной физики
Уровень образования	Магистр	Направление/специальность	Физика / Физика конденсированного состояния веществ

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Стоимость ресурсов научного исследования (НИ): материально-технических; энергетических; финансовых; информационных; человеческих; 2. Нормы и нормативы расходования ресурсов; 3. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Стоимость материальных ресурсов и специального оборудования в соответствии с рыночными ценами г. Томска. Тарифные ставки исполнителей определены штатным расписанием НИ ТПУ 2. Норма амортизационных отчислений на специальное оборудование. 3. Отчисления во внебюджетные фонды 30%
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения 2. Планирование научно-исследовательских работ 3. Составление бюджета внедрения инженерного 4. Оценка эффективности 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка конкурентоспособности проекта 2. Планирование работ в течении осуществления проекта. 3. Расчёт бюджета. 4. Определение ресурсной эффективности и перспектив научного исследования.
Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):	
<ol style="list-style-type: none"> 1. Оценка конкурентоспособности НИ 2. Матрица SWOT 3. Диаграмма Ганта 4. Бюджет НИ 5. Основные показатели эффективности НИ 	

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Кашук Ирина Вадимовна	к.т.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ81	Чжоу Синьтун		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа	ФИО
ОБМ81	Чжоу Синьтун

Школа	ИЯТШ	Отделение (НОЦ)	Экспериментальной физики
Уровень образования	Магистратура	Направление/специальность	Физика

Тема ВКР:

Анализ спектра высокого разрешения молекулы $HD^{34}S$ в полос $\nu_2+\nu_3$, $2\nu_1$	
Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:	
1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<i>Объектом исследования являются спектр высокого разрешения молекулы $HD^{34}S$. Работа получения спектра используется прибор Фурье-спектроскопия. Данная работа может применяться в физике, планетологии и атмосферной оптике для решения некоторых прикладных задач.</i>
Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:	
1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: <ul style="list-style-type: none"> – специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; – организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны. 	1. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы. 2. ГОСТ 12.0.003-2015. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация. 3. ГОСТ 12.1.005-88 (с изм. №1 от 2000 г.). ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (01. 01. 89). 4. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений. 5. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение. 6. ГОСТ 12.1.019-79. ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты. 7. ГОСТ 12.1.038-82. ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов. 8. ГОСТ 12.1.004-91. ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования. 9. ГОСТ 12.1.003-83 ССБТ. Шум. Общие требования (01. 07. 92).
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	1. Анализ выявленных вредных факторов: а) приводятся данные по оптимальным и допустимым значениям микроклимата на рабочем месте, перечисляются методы обеспечения этих значений б) приводятся данные по допустимым значениям

	<p>шума на рабочем месте</p> <p>в) приводится расчет освещенности на рабочем месте;</p> <p>г) приводятся данные по реальным значениям электромагнитных полей на рабочем месте;</p> <p>2. Анализ выявленных опасных факторов:</p> <p>а) электробезопасность (в т.ч. статическое молниезащита-источники-средства защиты);</p>
3. Экологическая безопасность:	Организация безотходного производства (приводится перечень отходов при эксплуатации установки, перечисляются методы улавливания, переработки, хранения и утилизации образовавшихся на вашем производстве промышленных отходов).
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях:	<p>Приводятся возможные ЧС: пожар;</p> <p>разработка мер по повышению устойчивости объекта к данной ЧС;</p> <p>разработка действий в результате возникшей ЧС и мер по ликвидации её последствий.</p>

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
---	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент ЭБЖ	Сечин А.А.	К.Т.Н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ81	Чжоу Синьтун		

Министерство образования и науки Российской Федерации
федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования магистратура

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

Магистерская диссертация

(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2019	Аналитический обзор литературы	15
01.09.2019	Объект и методы исследования	15
30.12.2019	Исследование энергетической структуры полос $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ молекулы HDS	20
30.03.2020	Расчёт и аналитический анализ	15
23.04.2020	Социальная ответственность	15
23.04.2020	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
05.05.2020	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШ ФВП	Бехтерева Е.С.	д.ф.-м.н		

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 96 с., 9 рис., 24 табл., 29 источник.

Ключевые слова. ИК-спектры, Фурье-спектроскопия, колебательно-вращательные спектры, спектроскопические параметры, диоксид серы.

Объектом исследования являются материнская молекула диоксида серы.

Цель исследования. Целью исследования является получение параметров модели Гамильтониана, корректно описывающей колебательно-вращательные уровни состояний ($v_1=v_2=1$) и ($v_2=v_3=1$) молекулы HD^{34}S .

В процессе исследования проводился анализ экспериментального колебательно-вращательного спектра молекулы HDS методом комбинационных разностей. Было получено около 1200 энергетических переходов, соответствующие 333 энергиям верхнего колебательного состояния.

В результате решения обратной спектроскопической задачи для каждого состояния был получен набор из 14 спектроскопических параметров (колебательных, вращательных и параметров центробежного искажения). Полученные наборы воспроизводят исходные данные с точностью, соответствующей экспериментальной.

Область применения. астрофизика, планетология и атмосферная оптика.

Полученные результаты используются для пополнения российских и зарубежных баз данных.

Положения, выносимые на защиту:

1. Полученный набор параметров эффективного гамильтониана позволяет воспроизводить колебательно-вращательный спектр полосы $\nu_1+\nu_2$ до $J^{\max} = 20$, $K_a^{\max} = 9$ точностью $1,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$.
2. Учет параметров центробежного искажения до 3го порядка позволяет получить описание полосы $\nu_2+\nu_3$ с точностью $7,6 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ до значений $J^{\max} = 16$, $K_a^{\max} = 10$.
3. Состояния $(\nu_1=\nu_2=1)$ и $(\nu_2=\nu_3=1)$ можно рассматривать как изолированные, определив параметры резонансного взаимодействия равными нулю.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение	16
1. Обзор литературы	20
1.1 Исследования прошлых лет	20
1.2 Теория возмущения	22
1.3 Электронно-колебательно-вращательный гамильтониан нелинейной молекулы	25
1.4 Эффективный гамильтониан изолированного состояния	27
2. Объект и методы исследования	32
2.1 Общая информация о молекуле HD^{34}S	32
2.2 Метод регистрации спектров	35
2.3 Метод комбинационных разностей	38
2.4 Модель эффективного Гамильтониана	40
3. Результаты проведенного исследования	41
3.1 Детали эксперимента	41
3.2 Интерпретация экспериментальных спектров	42
3.2 Решение обратной спектроскопической задачи	45
4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	49
4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения	49
4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования	49
4.1.2 Анализ конкурентных технических решений	49
4.1.3 Технология QuaD	51
4.1.4 SWOT-анализ	53
4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований	56
4.3 Планирование научно-исследовательских работ	56
4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования	56
4.3.2. Определение трудоёмкости выполнения работ	58
4.3.3 Разработка графика проведения научного исследования	59
4.3.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)	63

4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	69
5. Социальная ответственность при исследовании тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы HDS ..	71
5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности	71
5.2 Производственная безопасность	72
5.2.1 Анализ вредных производственных факторов и обоснование мероприятий по снижению воздействия	74
5.2.2 Анализ опасных производственных факторов и обоснование мероприятий по снижению воздействия	85
5.3. Экологическая безопасность	87
5.3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях	88
5.4 Заключение социальной ответственности	91
Заключение	92
Список литература:	93

Введение

Предметом данной работы является один из изотопических модификаций сероводорода, а именно молекула HD^{34}S .

Актуальность работы и постановка задачи: В условиях всевозрастающего увеличения числа прикладных исследований в области астрофизики и планетологии, возрастает и необходимость в проведении лабораторных исследований в области молекулярной спектроскопии высокого разрешения. Ведь именно колебательно-вращательная спектроскопия позволяют получать точную информации касательно внутренней структуры молекул. С помощью интерпретации спектров ученые могут определить основные характеристики молекул и в том числе различные эффекты внутримолекулярной природы.

Интерпретация спектров позволяет определить систему уровней энергии молекулы и найти спектроскопические постоянные, структурные параметры и потенциальную функцию исследуемой молекулы [1]. Такая информация необходима для решения многих прикладных задач в области планетологии, атмосферной оптике, астрофизике и т. д.

Актуальность работы заключается в следующем. Данное исследование позволяет определить упомянутые характеристики молекулы и, возможно, в будущем улучшить расчет потенциальной функции основной модификации сероводорода. Из [2]-[3] известно, что сероводород считается ценным химическим сырьем: из сероводорода возможно получить значительное

количество органических и неорганических соединений. Кроме того, сероводород является одним из загрязнителей атмосферы и поэтому существует потребность в разработке техник, позволяющих очистить газ от примесей сероводорода и, как следствие, сократить выбросы в атмосферу. Очистка газа от сероводорода регламентируется не только требованиями санитарно-гигиенического порядка, но и производственной необходимостью: предохранить аппаратуру и оборудование от разъедания при транспортировке, переработке и использовании газа; получить путем переработки очищенных газов продукты надлежащего качества без примесей сернистых соединений; иметь в некоторых случаях экономическую выгоду от извлечения элементарной серы.

Кроме того, летучая составляющая сероводорода играет важную роль в эволюции и извержении магм [4], а также в сжигании топлива в деятельности человека; поэтому данная молекула представляет интерес для изучения атмосферы Земли. Различные изотопологи сероводорода создают основу для изучения процессов, имевших место в ранней истории Земли [5]. Известно, что сероводород встречается в атмосферах газовых гигантов солнечной системы, комет, коричневых карликов, межзвездных облаков [6] и, таким образом, представляет научный интерес для определения состава этих космических объектов, условий, характерных для того или иного астрономического тела. Исследования такого рода не обходятся без анализа структуры спектров

высокого разрешения в различных спектральных диапазонах, в частности и в инфракрасном диапазоне.

Таким образом, в данном исследовании предполагается, что полученные результаты могут быть использованы для решения вышеупомянутых прикладных задач.

Объектом исследования являются спектр высокого разрешения молекулы HD^{34}S в области локализации колебательно-вращательных полос $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$. **Предметом** исследования данной работы являются спектральные характеристики одного из изотопологов молекулы сероводорода.

Целью работы является получение параметров модели Гамильтониана, корректно описывающей колебательно-вращательные уровни состояний $(\nu_1=\nu_2=1)$ и $(\nu_2=\nu_3=1)$ молекулы HD^{34}S .

Для достижения поставленной цели были определены следующие задачи:

1. Изучить теоретических основы молекулярной спектроскопии высокого разрешения: квантовая теория строения молекул [7], теория возмущения [8], основы построения эффективного гамильтониана изолированного состояния [9].

2. Изучить теорию симметрии и описать свойства молекулы HD^{34}S

3. Исследовать колебательно-вращательную структуру полосы $\nu_2 + \nu_3$ молекулы HD^{34}S в спектральном диапазоне от 2000 см^{-1} до 4000 см^{-1} . Получить экспериментальные уровни энергии.

4. Решить обратную спектроскопическую задачу и определить спектроскопические параметры для состояний ($v_1=v_2=1$) и ($v_2=v_3=1$).
5. Проанализировать полученные параметры.

Новизна: В данной работе проведен анализ спектров высокого разрешения полосы $\nu_1 + \nu_2$ (результаты анализа превосходят ранее опубликованные) и ранее неизученной полосы $\nu_2 + \nu_3$ молекулы HD^{34}S . В результате работы получена точная и подробная спектроскопическая информация об энергетических уровнях исследуемого состояния; рассчитаны спектроскопические параметры, отсутствующие в научной литературе на данный момент.

Практическая значимость: Идентификация линий спектра и решение обратной спектроскопической задачи позволяют получить отсутствующие в научной литературе параметры оператора гамильтона типа Уотсона молекулы HD^{34}S . Спектроскопическая информация об этой молекуле может быть использована для пополнения банков данных спектроскопической информации и может применяться в физике, планетологии и атмосферной оптике для решения некоторых прикладных задач.

1. Обзор литературы

1.1 Исследования прошлых лет

Исследование молекулы сероводорода, в том числе и исследование колебательно-вращательной структуры, активно проводится с момента, когда исследуемая молекула была обнаружена в составе межзвездных облаков. Таким образом, первые исследования колебательно-вращательной структуры молекулы сероводорода были проведены в 1985 году. Так как полуэмпирические методы исследования колебательно-вращательных спектров напрямую зависят от точности эксперимента, то улучшение техники и методики эксперимента позволяет с более высокой точностью определить положение линий в спектре, что в свою очередь влияет на значение спектроскопических параметров молекулы. Более того, повторное исследование спектров даёт возможность определить большее количество энергетических переходов и определить запрещенные переходы, что с количественной точки зрения так же положительно влияет на точность определяемых параметров.

В настоящее время, Фурье-спектроскопия позволяет с высокой точностью зарегистрировать экспериментальные спектры, что так же увеличивает точность полученных результатов – определение энергетической структуры молекулы и ее внутренних свойств.

В 1985 году С. Ками-Пейре, Ж. М. Фло, Л. Лешуга-Фосса и Дж. Джонс провели эксперимент анализа вращательного спектра сероводорода в диапазоне $25 - 280 \text{ см}^{-1}$ с помощью Фурье- спектрометра при разрешении $0,004 \text{ см}^{-1}$ [10]. Были получены точные значения вращательные параметры и центробежного искажения из наблюдаемых положений линий для четырех изотопомеров сероводорода (D_2^{32}S , D_2^{34}S , HD^{32}S и HD^{34}S). А также представлен список расчета положения линий и вычислен значения интенсивностей.

В 1995 году О. Н. Улеников, Р.Н Толченев, М. Коивуссари и другие проанализировали колебательно-вращательную структуру полос $\nu_1+\nu_2$, $\nu_2+\nu_3$ молекулы HD^{32}S и ν_3 , $\nu_1+\nu_2$ молекулы HD^{34}S с помощью Фурье спектром высокого разрешения в области $2400\text{-}3000\text{см}^{-1}$ [11]. Были получены центры полос и вращательные параметры, параметры центробежного искажения и резонанса, которые воспроизводят начальные значения верхних энергетических уровней со средней точностью $1,39 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для состояний (110) и (011) D_2^{32}S , $1,61 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ и $1,82 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для состояний (001) и (110) HD^{32}S и $2,09 \times 10^{-4} \text{ см}^{-1}$ для состояния (110) HD^{34}S соответственно.

В 2001 году В. Г. Тютюрев, С. А. Ташкун, Д.Швенке опубликовали работу, где была получена потенциальная функция основного электронного состояния молекулы сероводорода [12]. Более 12000 экспериментальных вращательных переходов было получено для соответствующих 4175 верхних уровней с $J_{\text{max}} = 15$ различных колебательных состояний 7 изотопомеров

сероводорода (H_2^{32}S , H_2^{34}S , D_2^{32}S , D_2^{34}S , HD^{32}S и HD^{34}S). Среднеквадратичное отклонение для полученного набора параметров составило 0.03 см^{-1} .

В 2012 году Е.Р. Половцева, Н.А. Лаврентьева, С.С. Воронина и [13] сделали систематизацию всех опубликованных данных полученных в настоящее время различными авторами из анализа спектров высокого разрешения, колебательных колебаний сероводорода и его изотопологов.

В 2017 году А.Ю. Ахлестин, С.С. Воронина, О.В. Науменко и другие провели анализ данных, опубликованных по параметрам спектральной линии для изотопологов молекулы сероводорода (HDS , HD^{34}S , D_2S и D_2^{34}S) [14]. Они проделали расчет при помощи специального программного обеспечения и проанализировали качество данных в информационной системе WADIS. Колебательно-вращательные переходы и энергетические уровни изотопологов молекулы сероводорода зарегистрированы в базе данных WADIS (<http://wadis.saga.iao.ru/>).

1.2 Теория возмущения

В квантовой механике только ограниченное число задач может быть решено точно, как это было сделано, например, для осциллятора [8]. Для нахождения решения волнового уравнения во многих случаях приходится прибегать к различным приближённым методам. Одним из таких методов, получившим наиболее широкое распространение, является теория возмущений.

Предположим, что гамильтониан системы может быть записан в следующем виде:

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{h} \quad (1)$$

где \widehat{H}_0 — оператор невозмущённой системы, \widehat{h} — оператор возмущения. \widehat{h} — малый оператор в сравнении с \widehat{H}_0 .

С другой стороны, колебательно-вращательный Гамильтониан можно представить в следующем виде [9]:

$$H = H_0 + \sum_{n=1}^{\infty} H_n(k^n) \quad (2)$$

где $H_n(k^n)$ - оператор порядка малости k^n по отношению к оператору H_0 .

Решение уравнение Шредингера с оператором \widehat{H}_0 известно $-\widehat{H}_0\psi_n^0 = E_n^{(0)}\psi_n^{(0)}$ (т.е. для любого n известны $\psi_n^{(0)}$ и $E_n^{(0)}$), собственные функции оператора \widehat{H}_0 образуют ортонормированный базис

$$\int \psi_n^{(0)}(r)\psi_m^{(0)}(r)dv = \delta_{nm} \quad (3)$$

Решение уравнения Шредингера с оператором \widehat{h} есть

$$E_n = E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + E_n^{(3)} + \dots \quad (4)$$

$$\psi_n = \psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(2)} \psi_k^{(0)} + \dots \quad (5)$$

Подставив, полученные результаты (4-5) и (2) в уравнение (1), получим следующее:

$$\begin{aligned}
& (\widehat{H}_0 + \hat{h}) \left(\psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(2)} \psi_k^{(0)} \right) = \\
& = \left(E_n^{(0)} + E_n^{(1)} + E_n^{(2)} + E_n^{(3)} + \dots \right) (\psi_n^{(0)} + \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} \\
& + \sum_k C_{nk}^{(2)} \psi_k^{(0)} + \dots
\end{aligned}$$

Сравнение величин по порядкам малости:

$$\mathfrak{x}^0 \quad \widehat{H}_0 \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \psi_n^{(0)}$$

$$\mathfrak{x}^1 \quad \widehat{H}_0 \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + \hat{h} \psi_n^{(0)} = E_n^{(0)} \sum_k C_{nk}^{(1)} \psi_k^{(0)} + E_n^{(1)} \psi_n^{(0)}$$

и т.д.

Для определения второго порядка теории возмущений, необходимо определить поправку к энергии системы. Ограничиваясь в разложении волновой функции ψ и энергии E членами до второго порядка малости включительно и подставляя их в уравнение Шредингера, получаем

$$(E_n^0 - H^0) \psi_n'' = -(E_n' - V') \psi_n' - E_n'' \psi_n^0$$

Учитывая, что решение ψ_n^{0*} однородного уравнение должно быть ортогональным к правой части:

$$\int \psi_n^{0*} \psi_n' d^3x = 0, \quad (6)$$

и находим поправку второго порядка к энергии системы:

$$E_n'' = \int \psi_n^{0*} V' \psi_n' d^3x = \sum_{n'} \frac{|V_{n'n}^0|^2}{E_n^0 - E_{n'}^0} \quad (7)$$

Однако при решении задач молекулярной физики возникают неэрмитовы вклады в оператор энергии. В этом случае применение обычной теории

возмущений невозможно. Чтобы избежать подобных трудностей был разработан метод эффективных операторов [9].

1.3 Электронно-колебательно-вращательный гамильтониан нелинейной молекулы

Известно, что решение уравнения Шредингера непосредственным образом зависит от того, в каком виде выбирается гамильтониан молекулы H . Поэтому не менее важной задачей, чем решение уравнения Шредингера, является задача построения гамильтониана молекулы.

С физической точки зрения молекула представляет собой систему, состоящую из ядер атомов и электронов. Поэтому Гамильтониан, используемый для решения уравнения Шредингера, также должен учитывать координаты и спины всех частиц, составляющих молекулу. Помимо этого, в уравнении следует принять во внимание и все типы взаимодействий между этими частицами. Построение такого Гамильтониана довольно трудоемкий процесс. Реальный путь к теоретическому описанию спектра молекул заключается в использовании различных видов приближений при построении гамильтониана молекул.

В молекулярной спектроскопии принято пренебрегать релятивистскими эффектами и, как правило, используются гамильтонианы следующего вида [9]:

$$H = T_{\text{яд}} + T_{\text{эл}} + V \quad (8)$$

где $T_{\text{яд}}$ и $T_{\text{эл}}$ – операторы кинетической энергии ядер и электронов; V – оператор потенциальной энергии молекулы. Данный оператор учитывает энергию кулоновского притяжения электронов к ядрам и энергию электронного и межъядерного отталкивания. Следовательно, операторы $T_{\text{яд}}$, $T_{\text{эл}}$ и V имеют вид:

$$\begin{aligned} T_{\text{яд}} &= \frac{-\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \\ T_{\text{эл}} &= \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \\ V &= \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\substack{N,N' \\ N>N'}} \frac{z_N z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e z_N}{r_{iN}}. \end{aligned} \quad (9)$$

где m_N и m_e – массы ядер и электронов; z_N и e – заряды ядер и электрона; $r_{ab} = [(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 + (z_a - z_b)^2]^{1/2}$ – расстояние между a -й и b -й частицами. Заметим, что x_N , x_i – это координаты электронов и ядер в декартовой пространственно-фиксированной системе.

Суть преобразования заключается в следующем: Гамильтониан молекулы, как и любая функция системы обобщенных координат x_n и производных по ним $\partial/\partial x_n$. Если известен закон преобразования координат и их производных, можно найти новую обобщенную систему координат q_m [9]:

$$x_n = f_n(q_m), \partial/\partial x_n = \Phi_n(q_m, \partial/\partial q_l). \quad (10)$$

Как известно, если преобразование (10) неособенное, т. е. Якобиан преобразования $D(x_1, \dots, x_n)/D(q_1, \dots, q_n)$ отличен от нуля, то всегда можно определить соотношения типа (10) для производных и выразить старые координат как функции новых. Для определения производных $\partial/\partial x_n$

необходимо найти матрицу, обратную матрице $\partial/\partial q_m$, что в некоторых случаях является сложной задачей.

В этой работе формулы типа (10) определяются из следующих соображений. Предположим, что координаты x_n (следовательно, и q_m) есть функция некоторого параметра t (например времени). Тогда можно показать, что формулы (10), выражающие производные $\partial/\partial x_n$ (или с точностью до множителя $-i\hbar$ операторы импульсов $-i\hbar \partial/\partial x_n$) через производные $\partial/\partial q_m$ (оператор P_m) и координаты q_m , имеют точно такой же вид, что и формулы, выражающие классические величины p_{x_n} через q_m и p_{q_m} . Здесь

$$P_{x_n} = \partial L / \partial \dot{x}_n, \quad (11)$$

$$p_{q_m} = \partial L / \partial \dot{q}_m, \quad (12)$$

$$\dot{x}_n = dx_n / dt,$$

$$\dot{q}_m = dq_m / dt, \quad (13)$$

а L – произвольный в общем случае полином переменных \dot{x}_n (или \dot{q}_m):

$$L = \sum_{i \dots j} a_{i \dots j}(x_n) \dot{x}_i \cdot \dots \cdot \dot{x}_j + \dots + \sum_i a_i(x_n) \dot{x}_i + a(x_n). \quad (14)$$

1.4 Эффективный гамильтониан изолированного состояния

Суть представленного метода может быть выражена следующим образом. Решение уравнение Шредингера с исходным Гамильтонианом H настолько сложно, что требует применения некоторых специальных техник, позволяющих значительно облегчить поиск решения. С этой целью путем применения

последовательных преобразований строится Гамильтониан H' , аналогичный первоначальному, но значительно уменьшенный. При проведении преобразований должен выполняться ряд условий, в числе которых ключевыми являются следующие.

Решение уравнения Шрёдингера с этим новым оператором можно получить в явном виде. Множество всех решений уравнения Шрёдингера с оператором H' согласуется с некоторым подмножеством множества всех решений уравнения Шрёдингера с исходным оператором H .

Оператор H' , удовлетворяющий этим требованиям, называется эффективным.

Математически задача построения эффективного гамильтониана $\tilde{H}_{\alpha_0\alpha_0}$ состояния $|\alpha_0\rangle = 0$ описывается следующим образом.

Когда $\tilde{H}_{\text{эфф}}$ вырождается в один оператор \tilde{H}_{00} , выполняется два условия:

$$\begin{aligned}\langle 0|\tilde{H}|\alpha\rangle &\equiv \langle 0|G^+HG|\alpha\rangle = 0 \\ \langle \alpha|\tilde{H}|0\rangle &\equiv \langle \alpha|G^+HG|0\rangle = 0\end{aligned}\tag{15}$$

здесь G является произвольным унитарным оператором.

Оператор \tilde{H} строится как

$$\tilde{H} = G^+HG\tag{16}$$

где G — произвольный унитарный оператор. Спектр собственных значений оператора не меняется при унитарном преобразовании. Для того чтобы выбрать

оператор G в виде (17), необходимо чтобы оператор $(G-1)$ стал малым по сравнению с единичным оператором.

$$G = \exp (i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(x^n)) \quad (17)$$

где $g_n = g_n(a,b)$ — малые эрмитовы операторы порядка x^n .

Оператор G выберем таким образом, чтобы все элементы типа $\langle \alpha^0 | H' | \beta' \rangle$ или $\langle \alpha' | H' | \beta^0 \rangle$ обратились в нули.

$$\langle \alpha | H' | \beta \rangle = \begin{pmatrix} & 0 & 0 & \dots \\ \tilde{H}_{эфф} & \dots & \dots & \dots \\ & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \end{pmatrix} \quad (18)$$

Условия (17) являются уравнениями, используемыми для определения оператора G . Если система уравнений (15) имеет решение, то можно построить эффективный оператор. Причем, в соответствии с определением, этим эффективным оператором \tilde{H}_{00} будет оператор

$$\tilde{H}_{00} = \langle 0 | \tilde{H} | 0 \rangle \equiv \langle 0 | G^+ H G | 0 \rangle \quad (19)$$

При выполнении условия (1), функции $G|0\rangle|A\rangle$, где $|0\rangle$ – собственные функции оператора H_0 , а $|A\rangle$ собственные функции исходного оператора H . Предварительно заметим, что соотношения (16) и (17) можно объединить следующим образом:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \tilde{H} - H_0 | \alpha \rangle &= 0 \\ \langle \alpha | \tilde{H} - H_0 | 0 \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (20)$$

где α — любая (в том числе и $\alpha=0$) из собственных функций оператора $H_0(\alpha)$. H_0 не зависит в силу условия (16) от координат α

Определим оператор G , удовлетворяющий соотношениям (15). Этот оператор можно считать заданным, если будут известны все его операторные матричные элементы $\langle \alpha | G | \beta \rangle$ на собственных функциях оператора H_0 начального приближения. С другой стороны, оператор G будет задан, если определить величины $\langle \alpha | g_n | \beta \rangle$ для произвольных значений функций $\langle \alpha |$ и $|\beta \rangle$.

Для того чтобы определить эти величины $\langle \alpha | g_n | \beta \rangle$ подставим (16) в (15) и используем формулу Хаусдорфа, которая позволяет записать операторную экспоненту (17), в виде ряда

$$G = 1 + i \sum_{n=1}^{\infty} g_n + \frac{1}{2} (i \sum_{n=1}^{\infty} g_n)^2 + \dots \quad (21)$$

В результате получим для $\alpha \neq 0$

$$\langle \alpha | h + [H_0, i g_1] | 0 \rangle = 0$$

$$\left\langle \alpha \left| [h, i g_1] + \frac{1}{2} [[H_0, i g_1], i g_1] + [H_0, i g_2] \right| 0 \right\rangle = 0$$

$$\left\langle \alpha \left| [h, i g_2] + [H_0, i g_3] + \frac{1}{2} [h, i g_1], i g_1 + \frac{1}{2} [[H_0, i g_2], i g_1] + \right. \right. \\ \left. \left. \frac{1}{2} [[H_0, i g_1], i g_2] + \frac{1}{6} [[[H_0, i g_1], i g_1], i g_1] \right| 0 \right\rangle = 0$$

и так далее.

Пользуемся

$$\left[1 - i g_1 - i g_2 - i g_3 + \frac{1}{2} (i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) - \frac{1}{6} (i g_1 + i g_2 + \right. \\ \left. i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) \right] (H_0 + h) [1 + i g_1 + i g_2 + i g_3 +$$

$$\frac{1}{2}(ig_1 + ig_2 + ig_3)(ig_1 + ig_2 + ig_3) - \frac{1}{6}(ig_1 + ig_2 + ig_3)(ig_1 + ig_2 + ig_3)(ig_1 + ig_2 + ig_3)] \quad (22)$$

Молекула HD^{34}S относится к группе симметрии C_s и является молекулой типа асимметричного волчка, имея три нормальных колебания. Рассмотрим отдельно переход с основного состояния на состояние (011) , т.е. когда возбуждены второе и третье колебания ν_2 и ν_3 . Учитывая условия на унитарные операторы, найдем явный вид матричного элемента $\langle 011 | ig_n | \alpha \rangle$. Систематизируем формулу (23) по порядкам малости. Для первого порядка малости уравнение примет вид:

$$\langle 011 | \left[H_0 | \beta \rangle \langle \beta | ig_1 | \alpha \rangle + \langle 011 | h | \alpha \rangle - \sum_{\gamma} ig_1 | \gamma \rangle \langle \gamma | H_0 | \alpha \rangle \right] = 0$$

Для второго порядка:

$$\langle (011) | \left[1 * H_0 * ig_2 + 1 * h * ig_1 - ig_1 * H_0 * ig_1 - ig_1 * h * 1 - ig_2 * H_0 * 1 + 1 * H_0 * \frac{1}{2} (ig_1)^2 \right] | \alpha \rangle$$

и получим

$$\langle 011 | ig_1 | \alpha \rangle = \frac{\langle 011 | h | \alpha \rangle}{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{010}}$$

$$\langle 011 | ig_2 | \alpha \rangle = \sum_{\beta} \frac{\langle 011 | ig_1 | \beta \rangle \langle \beta | h | \alpha \rangle - \langle 011 | h | 011 \rangle \langle 011 | ig_1 | \alpha \rangle}{(\varepsilon_{010} - \varepsilon_{\alpha})^2}$$

2. Объект и методы исследования

2.1 Общая информация о молекуле HD³⁴S

Молекула HDS является асимметричным волчком в A -редукции и I' -представлении. Её вращательные постоянные A , B , C – разные. Значение параметра симметрии [1] определяется по формуле:

$$k = (2B - A - C) / (A - C) \cong -0.489, \quad (23)$$

$$A = \frac{h}{8\pi^2 c I_A}, \quad B = \frac{h}{8\pi^2 c I_B}, \quad C = \frac{h}{8\pi^2 c I_C}, \quad (24)$$

где I_A , I_B , I_C – главные моменты инерции в порядке возрастания:

$$I_A = 0.2876 \cdot 10^{-39} \text{ г} \cdot \text{см}^2$$

$$I_B = 0.5687 \cdot 10^{-39} \text{ г} \cdot \text{см}^2$$

$$I_C = 0.8562 \cdot 10^{-39} \text{ г} \cdot \text{см}^2$$

Тогда

$$A = 9.4374 \text{ см}^{-1}$$

$$B = 4.9225 \text{ см}^{-1}$$

$$C = 3.2692 \text{ см}^{-1}$$

Молекула HD³⁴S изоморфна точечной группе симметрии C_s [15]. Её структура представлена на рисунке 1.

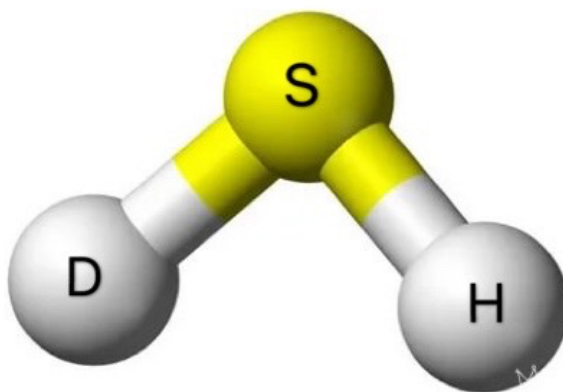


Рисунок 1 - Структура молекулы HD^{34}S

Точечная группа C_s имеет два элемента E и σ_h .

Структура молекулы HD^{34}S совпадет с изначальной структурой при выполнении тождественной операции (E) и операции отражения в плоскости (σ_h) упомянутый выше:

1. Тожественная операция E (рисунок 2);

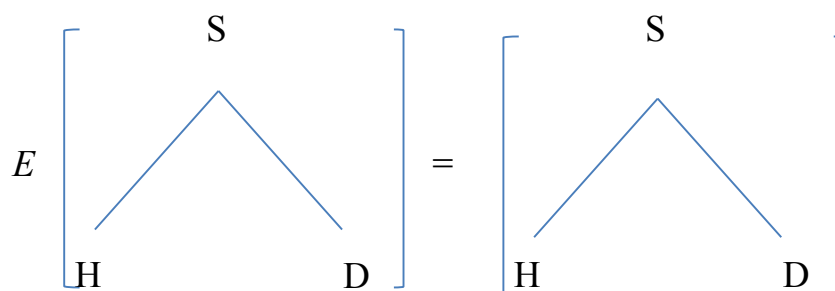


Рисунок 2 – Тожественная операция E

2. Операция отражения σ_h в плоскости xz , (рисунок 3).

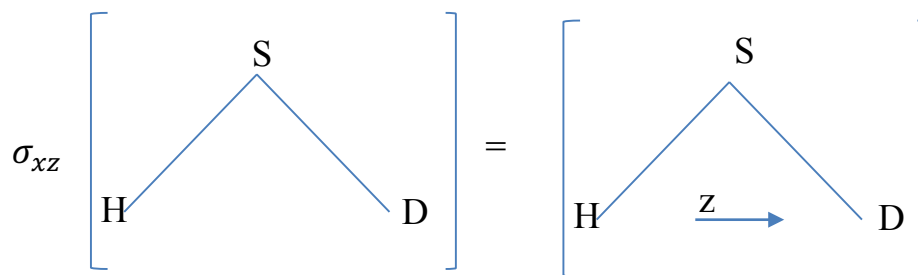


Рисунок 3 – Плоскость симметрии σ_h

Характеры неприводимых представлений отображены в таблице 1.

Таблица 1 - Характеры неприводимых представлений молекулы HD^{34}S .

C_s	E	σ_h	базисы	
A'	1	1	x, y, R_z	x^2, y^2, z^2
A''	1	-1	z, R_x, R_y	xy, yz, xz

Свойства симметрии, представленные в таблице 1, были использованы для определения симметрии нормальных колебаний и, как следствие, правил отбора для исследуемых полос: $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3 \in A'$.

Таким образом возможны переходы:

1. a – типа, где правила отбора имеют вид:

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \text{четные}; \Delta K_c = \text{нечетные}$$

2. b – типа, где правила отбора имеют вид:

$$\Delta J = 0, \pm 1; \Delta K_a = \text{нечетные}; \Delta K_c = \text{нечетные}$$

Переходы b -типа более сильные, поэтому для анализа были использованы правила отбора, характерные для этого типа.

2.2 Метод регистрации спектров

Методы инфракрасной спектроскопии основаны на том факте, что молекулы поглощают электромагнитное излучение лишь на определенных длинах волн. Такие поглощения образуют «провалы» в спектрах, и эти провалы мы видим, как линии в спектре. Эти линии, в свою очередь, соответствуют переходам между определенными колебательно-вращательными уровнями, которым присущи определенные квантовые числа. Регистрация спектра высокого разрешения и последующий анализ позволяет определить, на какой частоте молекула поглотила энергию, и переходу между какими уровнями соответствует та или иная линия.

Для того чтобы зарегистрировать спектр высокого разрешения часто используются именно Фурье спектрометры. Основными элементами любого Фурье-спектрометра являются источник света, светоделитель, интерферометр, ячейка для образцов, детектор и компьютерная системы обработки данных. Фурье спектрометр является типичным представителем интерферометрического инфракрасного спектрометра, принцип работы которого отличается от дисперсионного инфракрасного спектрометра. Такой спектрометр не имеет монохроматора и щели, а для получения интерферограммы падающего света использует интерферометр Майкельсона. Затем посредством математического Фурье преобразования, интерферограмма преобразуется в график частотной функции [16].

Принцип работы интерферометра Майкельсона заключается в следующем. Свет, происходящий от источника света, делится на два пучка с помощью светоделителя. При этом один луч передается на движущееся зеркало, а другой луч отражается на неподвижном зеркале. Далее два луча возвращаются в светоделитель. Движущееся зеркало перемещается линейно с постоянной скоростью и поэтому между двумя лучами образуется разность хода. Это приводит к интерференции. После светоделителя интерферирующий свет проходит через ячейку образца и достигает детектора. Попадающий на детектор сигнал обрабатывается с помощью преобразования Фурье, и из интерферограммы получается спектр пропускания.

Основным элементом Фурье – спектрометра, как уже было отмечено, является интерферометр Майкельсона (рисунок 4). В качестве источника используется когерентный источник излучения с определенной длиной волны. Когда разность хода двух лучей, поступающих в приемник, равна $\lambda / 2$ (т. е. лучи попадают в противофазу), интенсивность света, зарегистрированная приемником, близка к нулю. Когда правое зеркало интерферометра Майкельсона перемещается, изменяется разность лучей и изменяется интенсивность света, регистрируемая приемником. Очевидно, что интенсивность света является максимальной, когда разность хода кратна длине волны λ .

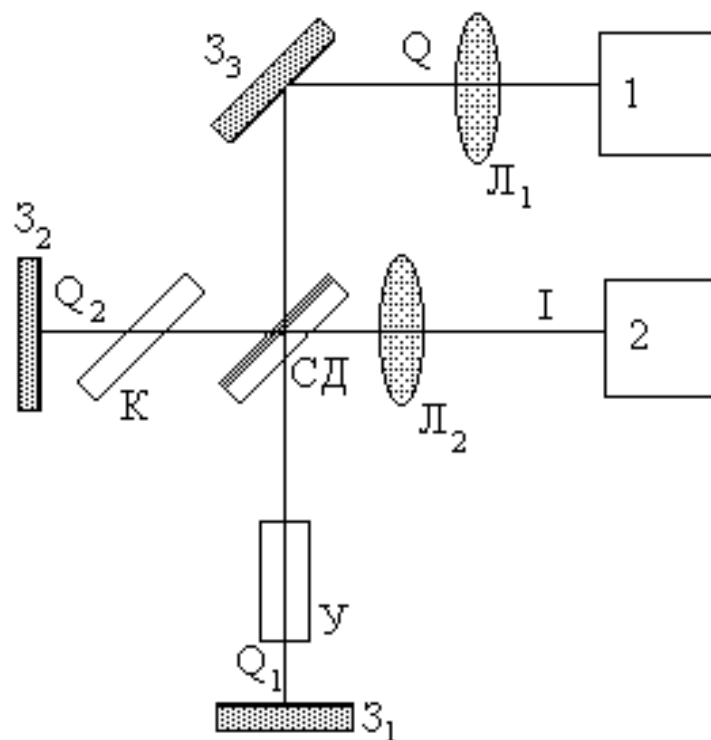


Рисунок 4 – Установка Фурье-спектрометра

1 - источник света; 2 - фотоприемник; 3 - зеркала; С.Д.- светоделитель; К – компенсатор; У - устройство изменения разности хода; Л - линзы (не обязательны)

Обработка сигнала происходит по следующему принципу. Перемещаясь с постоянной скоростью, зеркало является причиной разности хода. Это приводит к появлению сигнала синусоидальной формы. При этом период синусоиды определяется такими характеристиками источника как длина волны и амплитуда интенсивности. Если источник некогерентный, то каждой длине волны от источника будет соответствовать своя синусоида в качестве выходного сигнала. Это называется комплексный сигнал. Используя Фурье преобразование можно преобразовать такой сигнал и получить спектр

излучения источника (т. е. интенсивность излучения источника на разных длинах волн) [16].

2.3 Метод комбинационных разностей

Анализ, зарегистрированных с помощью Фурье-спектрометра, данных производится методом комбинационных разностей. Основная идея данного метода заключается в том, что рассматриваются переходы между вращательными уровнями основного и возбуждённого колебательных состояний. Известно, что обязательно существует несколько переходов с вращательных уровней основного колебательного состояния на один и тот же уровень возбуждённого колебательного состояния (рисунок 5). Обычно, основное колебательное состояние известно с высокой точностью из анализа спектров в микроволновом диапазоне. В свою очередь, колебательно – вращательный спектр содержит в себе информацию о переходах между энергетическими уровнями. Таким образом, зная тонкую структуру основного состояния и зная, что переходы совершаются на один и тот же уровень возбужденного состояния, остается только опередить советующие переходы из спектра. Для этого, создается «линейка». «Линейка» создается таким образом, что расстояния между делениями соответствуют вращательной структуре основного колебательного состояния (рисунок 6). Передвигая заданную «линейку» по экспериментальному спектру, обнаруживаются линии

(количество которых определяется количеством делений линейки), которые совпадают с делениями.

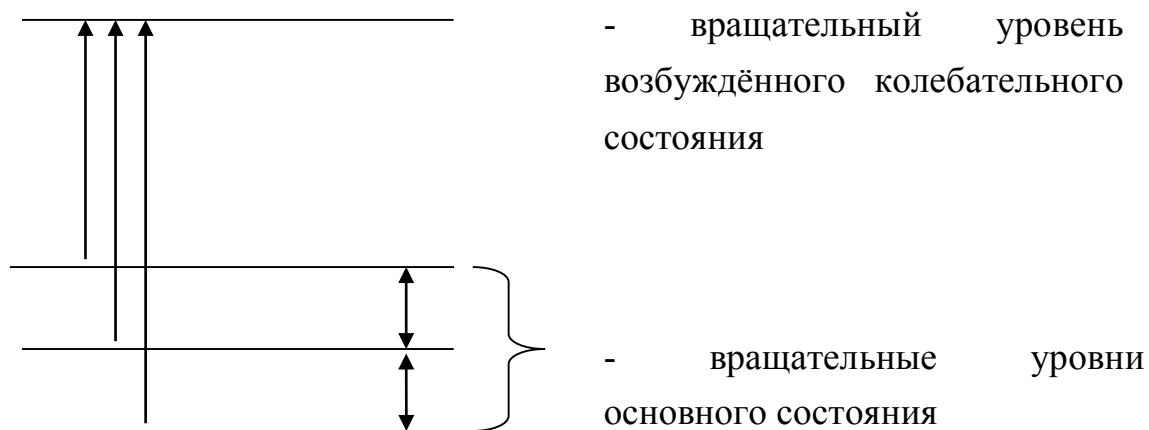


Рисунок 5 - Переход с вращательных уровней основного колебательного
состояния

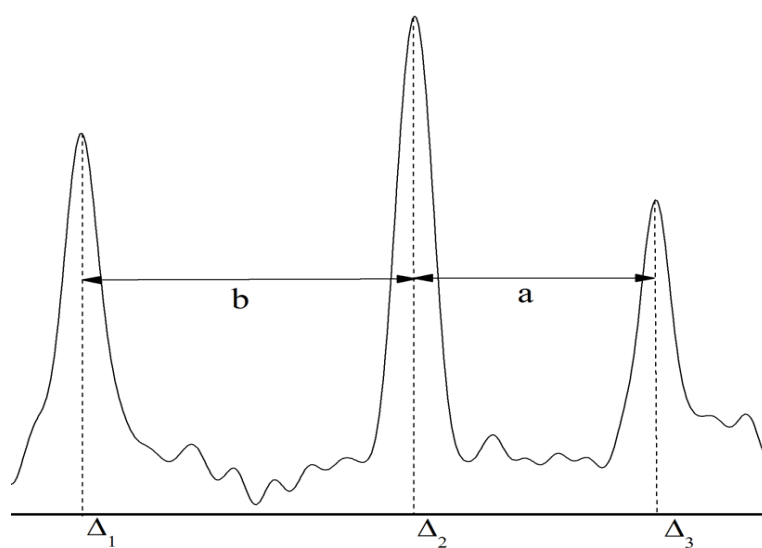


Рисунок 6 - Метод комбинационных разностей

Зная положение нижнего уровня, длины волн переходов, можно рассчитать энергию верхнего уровня. При наличии нескольких комбинаций

совпадений выбирается тот, который советуем заданной точности поиска «с». Это значит, что при отклонении центра линии спектра от деления «линейки» на величину меньшую или равную «с», результат принимают как верный (обычно $c \approx 0,0015 \text{ см}^{-1}$), иначе ищется другой вариант.

2.4 Модель эффективного Гамильтониана

Эффективный гамильтониан имеет следующий вид:

$$H^{vib-rot} = \sum_{\nu, \tilde{\nu}}^2 |\nu\rangle \langle \tilde{\nu}| H^{\nu\tilde{\nu}} \quad (25)$$

В уравнении (25) суммирование проводится по всем взаимодействующим колебательным состояниям. Однако в данной задаче рассматриваются состояния $(\nu_1=\nu_2=1)$ и $(\nu_2=\nu_3=1)$ как изолированные.

Поэтому в качестве модели, использовался оператор Уотсона [17] для изолированного состояния:

$$H = E + \left[A - 1/2(B-C) \right] J_z^2 + 1/2(B+C) J^2 - \Delta_K J_z^4 - \Delta_{JK} J_z^2 J^2 - \Delta_J J^4 + \\ + H_K J_z^6 + H_{JK} J_z^4 J^2 + H_{JK} J_z^2 J^4 + H_J J^6 + L_K J^8 + \dots \quad (26)$$

Здесь J - компоненты оператора полного углового момента; A , B и C - эффективные вращательные постоянные, связанные с колебательным состоянием $\nu_2+\nu_3$, и другие параметры - коэффициенты центробежного искажения различных порядков. Оператор Уотсона представлен в A -редукции и I'' -представлении.

3. Результаты проведенного исследования

3.1 Детали эксперимента

Экспериментальный спектр в районе полос поглощения $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ (от 2000 до 4000 см^{-1}) был зарегистрирован на Фурье–спектрометре Bruker IFS120 HR в университете г. Брауншвейг (Германия).

Для анализа использовались два спектра. Спектры были зарегистрированы при условиях, которые приведены в таблице 2.

Таблица 2 – Экспериментальные условия.

Спектр	Диапазон, см^{-1}	Давление, мбар	Опт. длина, м
1	1600 - 4200	6,0	12
2	1750 - 4200	4,0	163

На рисунке 7 представлен зарегистрированный спектр высокого разрешения молекулы HD^{34}S в исследуемом диапазоне.

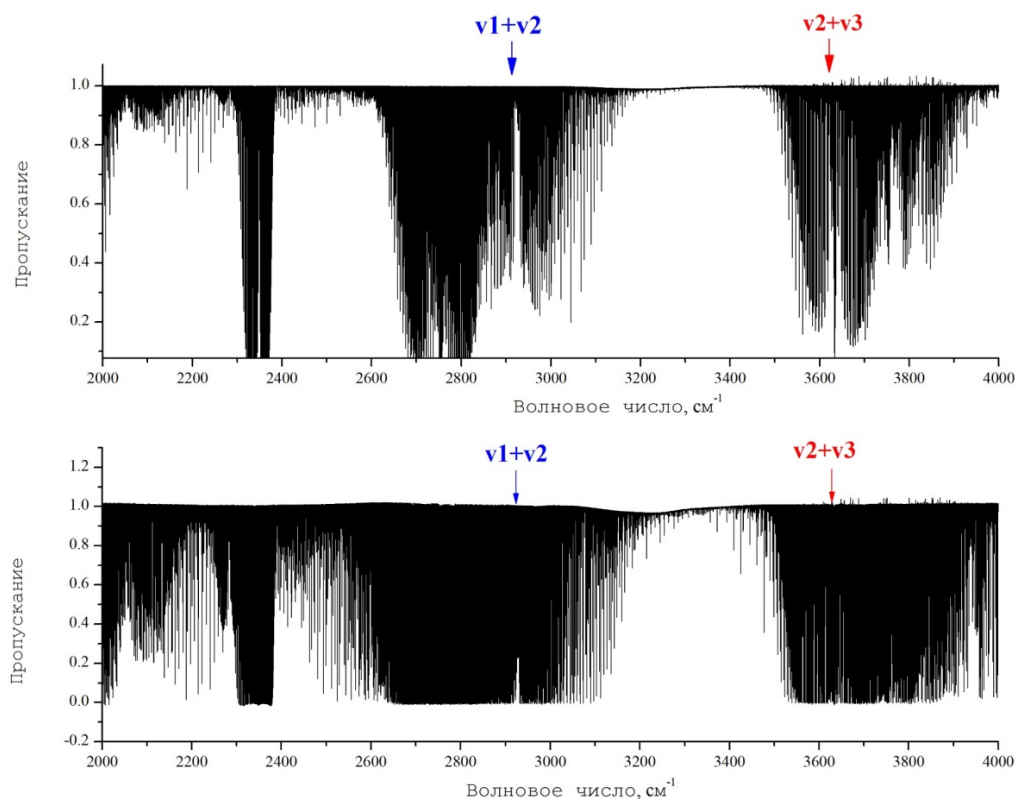


Рисунок 7 – Спектр полос $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ молекулы HD^{34}S .

3.2 Интерпретация экспериментальных спектров

В исследованном спектральном диапазоне расположена полосы $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ с центрами 2920.6597 и $3631.0006 \text{ см}^{-1}$ соответственно. Для анализа спектра использовались следующие правила отбора: $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm 1$.

Проведен анализ колебательно-вращательной структуры полос $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ на основе метода комбинационных разностей. Статистическая информация о результатах исследования приведена в таблице 3.

Таблица 3 – Статистическая информация

Полоса	$\nu_1 + \nu_2$	$\nu_2 + \nu_3$
J^{\max}	20	16
K_a^{\max}	9	10
Количество верхних уровней	149	184
Количество переходов	670	523

Часть определенных энергий верхнего возбужденного состояния ($\nu_1=\nu_2=1$) представлена в таблице 4, а для ($\nu_2=\nu_3=1$) в таблице 5.

Таблица 4 – Часть определенных энергий верхнего возбужденного состояния ($\nu_1=\nu_2=1$).

J	K_a	K_c	E (110)
1	0	1	2920.65990
1	1	1	2933.79650
2	0	2	2944.43025
2	1	2	2948.13335
3	0	3	2967.15261
3	1	3	2969.41925
4	0	4	2996.26934
4	1	4	2997.45700
5	0	5	3031.51234
5	1	5	3032.06863
6	0	6	3072.87619
6	1	6	3073.11673
7	0	7	3120.41925
7	1	7	3120.51783
8	0	8	3174.18310

8	1	8	3174.22217
9	0	9	3234.18815
9	1	9	3234.20356
10	0	10	3300.44004
10	1	10	3300.44598
11	0	11	3372.93391
11	1	11	3372.93412
12	0	12	3451.66575
12	1	12	3451.66575
2	1	1	2953.41396
3	1	2	2979.92307
4	1	3	3014.68045
5	1	4	3057.05985
7	1	6	3161.71672
8	1	7	3223.07256
9	1	8	3290.37512
10	1	9	3363.72644

Таблица 5 – Часть определенных энергий верхнего возбужденного состояния ($v_2=v_3=1$).

J	K_a	K_c	$E(011)$
1	0	1	3639.16524
1	1	1	3643.85805
2	0	2	3655.04644
2	1	2	3658.33326
3	0	3	3677.89049
3	1	3	3679.78044
4	0	4	3707.07182
4	1	4	3707.99457
5	0	5	3742.37596
5	1	5	3742.77515

6	0	6	3783.83216
6	1	6	3783.99208
7	0	7	3831.50643
7	1	7	3831.56670
8	0	8	3885.43213
8	1	8	3885.45409
9	0	9	3945.62758
9	1	9	3945.63160
10	0	10	4012.09250
10	1	10	4012.09016
11	0	11	4084.82122
11	1	11	4084.82122
12	0	12	4163.80441
12	1	12	4163.80441
2	1	1	3663.89356
3	1	2	3690.83621
4	1	3	3726.05121
5	1	4	3768.79172
7	1	6	3873.67837
8	1	7	3935.09036
9	1	8	4002.48409
10	1	9	4076.00665

3.2 Решение обратной спектроскопической задачи

Полученные значения энергетических уровней для каждой из полос были использованы в процедуре варьирования параметров эффективного гамильтониана, вид которого был описана в разделе 2.4. В результате фиттинга было определено 14 параметров для каждого состояния. Наборы параметров

представлены в таблицах 6 и 7. Указанные параметры описывают исходные данные с точностью, сравнимой с экспериментальной, - $1,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ и $7,6 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ для полос $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ соответственно. В таблицах 6 и 7 значения в скобках содержат в себе информацию о 1σ статистическом доверительном интервале.

Таблица 6 – Спектроскопические параметры эффективного гамильтониана состояния ($\nu_1=\nu_2=1$) молекулы HD^{34}S

Параметры	$\nu_1 + \nu_2$
E	2920,65970(12)
A	9,993398(13)
B	4,908103(16)
C	3,143814(13)
$\Delta_K \times 10^4$	-3,2351(58)
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	10,4133(65)
$\Delta_J \times 10^4$	0,9694(17)
$\delta_K \times 10^4$	8.222(12)
$\delta_J \times 10^4$	0.3379(12)
$H_K \times 10^6$	0.713(17)
$H_{KJ} \times 10^6$	-1.023(24)
$H_{JK} \times 10^6$	0.5940(82)
$H_J \times 10^6$	0.00218(98)

$h_K \times 10^6$	1.527(37)
-------------------	-----------

Таблица 7 – Спектроскопические параметры эффективного гамильтониана состояния ($v_2=v_3=1$) молекулы $HD^{34}S$

Параметры	$v_2 + v_3$
E	3630,99925(24)
A	9,705330(34)
B	5,012821(22)
C	3,1538151(98)
$\Delta_K \times 10^4$	-3.291(11)
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	10.3811(31)
$\Delta_J \times 10^4$	0.9966(15)
$\delta_K \times 10^4$	8.1453(71)
$\delta_J \times 10^4$	0.35292(88)
$H_K \times 10^6$	0.9100(89)
$H_{KJ} \times 10^6$	-1.2446
$H_{JK} \times 10^6$	0.6568
$H_J \times 10^6$	0.00506(77)
$h_K \times 10^6$	1.551(16)

Сравнивая значения параметров основного состояния с соответствующими значениями параметров состояний ($v_1=v_2=1$) и ($v_2=v_3=1$), можно увидеть, что значения не отличаются друг от друга более чем на

несколько %, что соответствует общей колебательно-вращательной теории [17] и говорит о физической обоснованности полученных результатов.

4. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

4.1 Оценка коммерческого потенциала и перспективности проведения научных исследований с позиции ресурсоэффективности и ресурсосбережения

4.1.1 Потенциальные потребители результатов исследования

Основным продуктом этого исследования являются спектральные параметры, которые будут использоваться для дополнения российских и международных баз данных. В свою очередь, последний широко используется для решения астрофизики, физики планет, атмосферной оптики и многих других проблем.

4.1.2 Анализ конкурентных технических решений

Анализ конкурентных технических решений определяется по формуле:

$$K = \sum B_i B_i. \quad (27)$$

где K – конкурентоспособность научной разработки или конкурента; B_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – балл i -го показателя.

Данные в Таблице 8 показывают хорошую степень конкурентоспособности, особенно в следующих критериях: уровень шума и возможность подключения к компьютерной сети.

Таблица 8 – Оценочная карта для сравнения конкурентных разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы			Конкурентоспосо бность		
		Б _ф	Б _{к1}	Б _{к2}	К _ф	К _{к1}	К _{к2}
Технические критерии оценки ресурсоэффektivности							
1.Время производства	0,05	4	3	3	0,20	0,15	0,15
2.Удобство в эксплуатации (соответствует требованиям потребителей)	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
3. Надёжность	0,05	5	3	3	0,25	0,15	0,15
4. Безопасность	0,15	5	4	4	0,75	0,60	0,60
5.Простота эксплуатации	0,05	4	4	5	0,20	0,20	0,25
6. Уровень шума	0,15	5	3	4	0,75	0,45	0,60
7. Возможность подключения в сеть ЭВМ	0,20	5	2	3	1,00	0,40	0,60

Экономические критерии оценки эффективности							
1. Конкурентоспособность продукта	0,05	4	5	4	0,20	0,25	0,05
2. Уровень проникновения на рынок	0,05	3	4	4	0,15	0,20	0,20
3. Послепродажное обслуживание	0,05	4	4	4	0,20	0,20	0,20
4. Предполагаемый срок эксплуатации	0,05	5	3	4	0,25	0,15	0,20
5. Срок выхода на рынок	0,05	4	5	3	0,25	0,25	0,25
6. Финансирование научной разработки	0,05	5	5	5	0,25	0,25	0,25
Итого	1	57	49	47	4,60	3,45	3,75

Данные в Таблице 8 показывают хорошую степень конкурентоспособности, особенно в следующих критериях: безопасность, уровень шума и возможность подключения к компьютерной сети.

4.1.3 Технология QuaD

Технология QuaD (QUality ADvisor) представляет собой гибкий инструмент измерения характеристик, описывающих качество новой

разработки и её перспективность на рынке и позволяющие принимать решение целесообразности вложения денежных средств в научно-исследовательский проект [18].

Оценка качества и перспективности по технологии QuaD определяется по формуле:

$$P_{cp} = \sum B_i B_i, \quad (28)$$

где P_{cp} – средневзвешенное значение показателя качества и перспективности научной разработки; B_i – вес показателя (в долях единицы); B_i – средневзвешенное значение i -го показателя.

Таблица 9 – Оценочная карта для сравнения конкурентных разработок

Критерии оценки	Вес критерия	Баллы	Максимальный балл	Относительное значение	Средневзвешенное значение
Показатели оценки качества разработки					
1.Время производства	0,05	85	100	0,85	0,0425
2.Энергоэффективность	0,1	93	100	0,93	0,093
3. Надёжность	0,05	86	100	0,93	0,043
4. Безопасность	0,15	88	100	0,88	0,132
5.Простота эксплуатации	0,05	96	100	0,96	0,048
6.Ремонтопригодность	0,15	94	100	0,94	0,141
7. Уровень шума	0,05	100	100	1	0,05
Показатели оценки коммерческого потенциала разработки					

8.Конкурентоспособность продукта	0,05	82	100	0,82	0,041
9.Уровень проникновения на рынок	0,05	69	100	0,69	0,0345
10.Унифицированность	0,05	79	100	0,82	0,041
11.Финансовая эффективность научной разработки	0,15	95	100	0,69	0,0395
12. Срок выхода на рынок	0,05	84	100	0,84	0,042
13.Перспективность рынка	0,05	96	100	0,96	0,48
Итого	1	88,23	100	0,882	0,069

Полученное значение Π_{cp} говорит о том, что перспективность данного производства выше среднего.

4.1.4 SWOT-анализ

SWOT – Strengths (сильные стороны), Weaknesses (слабые стороны), Opportunities (возможности) и Threats (угрозы) – Это комплексный анализ исследовательского проекта. SWOT-анализ используется для изучения внешней и внутренней среды проекта.

Сильные стороны. Сильные стороны – это факторы, характеризующие конкурентоспособную сторону научно-исследовательского проекта. Сильные

стороны свидетельствуют о том, что у проекта есть отличительное преимущество или особые ресурсы, являющиеся особенными с точки зрения конкуренции. Другими словами, сильные стороны – это ресурсы или возможности, которыми располагает руководство проекта и которые могут быть эффективно использованы для достижения поставленных целей.

Слабость – это недостаток, упущение или ограниченность научно-исследовательского проекта, которые препятствуют достижению его целей. Это то, что плохо получается в рамках проекта или где он располагает недостаточными возможностями или ресурсами по сравнению с конкурентами.

Возможности включают в себя любую предпочтительную ситуацию в настоящем или будущем, возникающую в условиях окружающей среды проекта, например, тенденцию, изменение или предполагаемую потребность, которая поддерживает спрос на результаты проекта и позволяет руководству проекта улучшить свою конкурентную позицию.

Угроза представляет собой любую нежелательную ситуацию, тенденцию или изменение в условиях окружающей среды проекта, которые имеют разрушительный или угрожающий характер для его конкурентоспособности в настоящем или будущем. В качестве угрозы может выступать барьер, ограничение или что-либо еще, что может повлечь за собой проблемы, разрушения, вред или ущерб, наносимый проекту.

Таблица 10 – SWOT анализ

	<p>Сильные стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>С1. Наличие бюджетного финансирования</p> <p>С2. Актуальность тематики</p> <p>С3. Использование современных программ</p> <p>С4. Использование собственной разработки программного обеспечения</p> <p>С5. Оригинальность решения поставленной задачи</p> <p>С6. Наличие всех материалов для исследования</p>	<p>Слабые стороны научно-исследовательского проекта:</p> <p>Сл1. Отсутствие прототипа научной разработки</p> <p>Сл2. Отсутствие потенциальных потребителей Сл3. Программное обеспечение с закрытым исходным кодом</p> <p>Сл4. Большая трудоёмкость работы Сл5. Долгое ожидание результатов эксперимента</p>
<p>Возможности:</p> <p>В1. Использование инновационной инфраструктуры ТПУ</p> <p>В2. Появление дополнительного спроса на результаты исследования</p> <p>В3. Возможность появления новых методов анализа</p> <p>В4. Расширение лаборатории</p> <p>В5. Возможность улучшения</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Сильные стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что нужно расширять лабораторию и попытаться улучшить программные обеспечения, чтобы увеличить эффективность программного обеспечения.</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и возможности» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования, чтобы уменьшить трудоёмкость работы.</p>

программного обеспечения		
<p>Угрозы:</p> <p>У1. Отсутствие спроса на результаты исследования</p> <p>У2. Развитая конкуренция других научных центров</p> <p>У3. Задержки финансирования</p> <p>У4. Ограничение точности эксперимента</p> <p>У5. Повышение издержек</p>	<p>По результатам интерактивной проекта полей стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что возможные угрозы при производстве, такие как отсутствие спроса и развитая конкуренция, могут сильно ослабить позиции данного научного исследования.</p> <p>тематика очень актуальна, и мы имеем оригинальные решения поставленной задачи молекулярной спектроскопии высокого разрешения, поэтому мы имеем конкурентоспособность</p>	<p>По результатам анализа интерактивной матрицы проекта полей «Слабые стороны и угрозы» можно сделать вывод о том, что мы должны развивать новые методы исследования. При необходимости можно стремиться к сотрудничеству с другими научными центрами.</p>

4.2 Определение возможных альтернатив проведения научных исследований

Альтернатив подобным исследованиям нет, за исключением таких же исследований, выполненных в иных научных центрах

4.3 Планирование научно-исследовательских работ

4.3.1 Структура работ в рамках научного исследования

Для проведения научных исследований создается рабочая группа, которая может включать исследователей и преподавателей, инженеров, техников и лаборантов, количество групп может варьироваться.

Таблица 11 – Перечень этапов, работ и распределение исполнителей

Основные этапы	Но раб	Содержание работ	Должность исполнителя
Разработка технического задания	1	Составление и утверждение технического задания	Руководитель, инженер
Выбор направления исследований	2	Выбор направления исследований	Руководитель, инженер
	3	Подбор и изучение материалов по теме	Руководитель, инженер
	4	Календарное планирование работ по теме	Руководитель, инженер
Теоретические и эксперименталь ные исследования	5	Выбор методики для исследования	Руководитель
	6	Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением	инженер
	7	Интерпретация спектра	инженер
	8	Решение обратной задач и получение результатов (спектроскопические параметры)	Руководитель, инженер

Обобщение и оценка результатов	9	Проверка полученных результатов	Руководитель, инженер
	10	Оформление вывода	Руководитель, инженер
Оформление комплекта документации по ВКР	11	Составление пояснительной записки	инженер
	12	Подготовка темы к защите	инженер

4.3.2. Определение трудоёмкости выполнения работ

Чтобы определить ожидаемое (среднее) значение трудоемкости, используется следующая формула:

$$t_{ожи} = \frac{3t_{мин i} + 2t_{макс i}}{5}, \quad (29)$$

где $t_{ожи}$ – наиболее вероятное время в течение, которого должна быть выполнена работа, чел-дни; $t_{мин i}$ – минимальное время для выполнения данного этапа при благоприятном стечении обстоятельств, чел-дни; $t_{макс i}$ – максимальное время для выполнения данного этапа при неблагоприятном стечении обстоятельств, чел-дни.

Исходя из ожидаемой трудоёмкости работ, определяется продолжительность каждой работы в рабочих днях T_p , учитывающая параллельность выполнения работ несколькими исполнителями:

$$T_{Pi} = \frac{t_{ожи}}{ч_i}, \quad (30)$$

где T_{pi} – продолжительность одной работы, раб. дней; $t_{ожі}$ – ожидаемая трудоёмкость выполнения одной работы, чел-дни; $Ч_i$ – численность исполнителей, выполняющих одновременно одну и ту же работу на данном этапе, чел.

4.3.3 Разработка графика проведения научного исследования

При поступлении в дипломные работы студенты в основном становятся участниками относительно небольших научных тем. Поэтому наиболее удобным и очевидным является построение ленточного графика для проведения научной работы в виде диаграммы Ганта.

Чтобы перевести продолжительность каждого этапа с рабочих на календарные дни, вам нужно использовать формулу:

$$T_{ki} = T_{pi} \cdot k_{\text{кал}}, \quad (31)$$

где T_{ki} – продолжительность выполнения i -й работы в календарных днях; T_{pi} – продолжительность выполнения i -й работы в рабочих днях; $k_{\text{кал}}$ – коэффициент календарности.

Коэффициент календарности определяется по следующей формуле:

$$k_{\text{кал}} = \frac{T_{\text{кал}}}{T_{\text{кал}} - T_{\text{вых}} - T_{\text{пр}}}, \quad (32)$$

где $T_{\text{кал}}$ – количество календарных дней в году; $T_{\text{вых}}$ – количество выходных дней в году; $T_{\text{пр}}$ – количество праздничных дней в году.

В 2014 году 365 календарных дней, из которых 104 выходных и 14 праздничных дней. Тогда коэффициент календаря:

$$k_{\text{кал}} = \frac{365}{365-104-14} = 1,48.$$

Таблица 12 – Временные показатели проведения научного исследования

N o	Название работ	Трудоёмкость работ						Испол н ители		Тр, раб. дн.		Тр, кал. дн.	
		tmin, чел-дн .		tmax, чел-дн.		toж, чел-дн.							
		Р	М	Р	М	Р	М	Р	М	Р	М	Р	М
1	Составление и утверждение технического задания	4	4	8	8	5,6	5,6	+	+	2,8	2,8	4	4
2	Выбор направления исследований	2	2	5	5	3,2	3,2	+	+	1,6	1,6	2	2
3	Подбор и изучение материалов по теме	12	12	20	20	15,2	15,2	+	+	7,6	7,6	10	10
4	Календарное планирование работ по теме	2	2	4	4	2,8	2,8	+	+	1,4	1,4	2	2
5	Выбор методики для исследования	3	-	5	-	3,8	-	+	-	3,8	-	4	-
6	Ознакомление с методикой исследованием	-	5	-	8	-	6,2	-	+	-	6,2	-	8















	и программным обеспечением												
7	Интерпретация спектра	-	30	-	35	-	32	-	+	-	32	-	40
8	Решение обратной задачи и получение результатов	20	20	25	25	22	22	+	+	11	11	15	15
9	Проверка полученных результатов	5	5	8	8	6,2	6,2	+	+	3,1	3,1	5	5
10	Оформление вывода	2	2	3	3	2,4	2,4	+	+	1,2	1,2	2	2
11	Составление пояснительной записки	-	13	-	16	-	14,2	-	+	-	14,2	-	18
12	Подготовка темы к защите	-	5	-	8	-	6,2	-	+	-	6,2	-	10

Р – руководитель; М – инженер

На основе таблицы 12 расписание календаря построено в виде диаграммы Ганта (таблица 13)

Таблица 13 – Календарный план-график проведения НИОКР по теме

No ра бо т	Вид работ	Исполните ли	T_{Ki} кал. дн.	Продолжительность выполнения работ											
				февр		март			апрель			май			и ю н ь
				2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3	

1	Составление и утверждение технического задания	Р, М	4														
2	Выбор направления исследований	Р, М	2	 													
3	Подбор и изучение материалов по теме	Р, М	10	 													
4	Календарное планирование работ по теме	Р, М	2	 													
5	Выбор методики для исследования	Р	4														
6	Ознакомление с методикой исследованием и программным обеспечением	М	8														
7	Интерпретация спектра	М	40														
8	Решение обратной задач и получение результатов (спектроскопические параметры)	Р, М	15									 					
9	Проверка полученных	Р, М	5										 				

	результатов																
10	Оформление вывода	Р, М	2														
11	Составление пояснительной записки	М	18														
12	Подготовка темы к защите	М	10														
Итого дней			120														

4.3.4 Бюджет научно-технического исследования (НТИ)

В процессе формирования бюджета НТИ используется следующая группировка затрат по различным статьям.

4.3.4.1 Расчёт материальных затрат НТИ

Расчёт материальных затрат осуществляется по следующей формуле:

$$З_m = (1 + k_T) \sum_{i=1}^m Ц_i N_{расх\ i}, \quad (33)$$

где m – количество видов материальных ресурсов, потребляемых при выполнении научного исследования; $N_{расх\ i}$ – количество материальных ресурсов i -го вида, планируемых к использованию при выполнении научного исследования (шт., кг, м, m^2 и т.д.); $Ц_i$ – цена приобретения единицы i -го вида потребляемых материальных ресурсов (руб./шт., руб./кг, руб./м, руб./ m^2 и т.д.); k_T – коэффициент, учитывающий транспортно-заготовительные расходы.

В данном научно-техническом исследовании нет материальных затрат, так как мы делаем теоретический анализ.

4.3.4.2 Расчёт затрат на специальное оборудование для экспериментальных работ

В данной статье включены все затраты, связанные с приобретением специального оборудования (приборов, приборов, стенов, устройств и механизмов), необходимых для выполнения работы по определенной теме. Все расчеты по приобретению специального оборудования и оборудования в организации приведены в таблице 14.

Таблица 14 – Расчёт бюджета затрат на приобретение спецоборудования для научных работ

Наименование оборудования	Количество единиц оборудования	Цена единицы оборудования, тыс. руб.	Общая стоимость оборудования, тыс. руб.
Персональный компьютер	2	40	40
Итого			40

4.3.4.3 Основная заработная плата исполнителей темы

Статья включает в себя основные оклады и дополнительные оклады. Также включен бонус, выплачиваемый ежемесячно из фонда заработной платы в размере 20-30% от тарифа или заработной платы:

$$З_{зп} = З_{осн} + З_{доп}, \quad (34)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата; $З_{доп}$ – дополнительная заработная плата (12 – 20 % от $З_{осн}$).

Основная заработная плата ($З_{осн}$) руководителя от предприятия рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{осн} = З_{дн} \cdot Т_p, \quad (35)$$

где $З_{осн}$ – основная заработная плата одного работника; $З_{дн}$ – среднедневная заработная плата работника, руб.; $Т_p$ – продолжительность работ, выполняемых научно – техническим работником, раб. дн. (таблица 12).

В таблице 15 показан баланс рабочего времени каждого работника.

Таблица 15 – Баланс рабочего времени

Показатели рабочего времени	Руководитель	Магистр
Календарное число дней	365	365
Количество нерабочих дней		
выходные дни:	52	104
праздничные дни:	14	14
Потери рабочего времени		
отпуск:	48	24
невыходы по болезни:	0	0
Действительный годовой фонд рабочего времени	251	223

Месячный должностной оклад работника:

$$З_m = З_{тс} \cdot (1 + k_{пр} + k_d) \cdot k_p, \quad (36)$$

где $Z_{тс}$ – заработная плата по тарифной ставке, руб.; $k_{пр}$ – премиальный коэффициент, равный 0,3 (т.е. 30% от $Z_{тс}$); k_d – коэффициент доплат и надбавок составляет примерно 0,2 – 0,5; k_p – районный коэффициент, для Томска равный 1,3.

Расчёт основной заработной платы приведён в таблице 16.

Таблица 16 – расчёт основной заработной платы

Исполнители	$Z_{тс}$, руб.	k_d	k_p	Z_m , руб	$Z_{дн}$, руб.	T_p , раб. дн.	$Z_{осн}$, руб.
Руководитель	43000	0,35	1,3	48560	2012	44	88528
Инженер	14874,5	0,35	1,3	25524,6	945,4	116	13200

Общая заработная исполнителей работы представлена в таблице 17.

Таблица 17 – Общая заработная плата исполнителей

Исполнитель	$Z_{осн}$, руб.	$Z_{доп}$, руб.	$Z_{зп}$, руб.
Руководитель	88528	11508,9	100039
Инженер	13200	14256,6	27456,6

4.3.4.4 Отчисления во внебюджетные фонды (страховые отчисления)

Данная статья расходов отражает обязательные взносы в установленных законодательством Российской Федерации к нормам государственного социального страхования (ФСС), пенсионного фонда (ПФ) и медицинского страхования (ФФОМС) от затрат на рабочую силу.

Величина этих отчислений определяется по формуле:

$$З_{внеб} = k_{внеб} \cdot (З_{осн} + З_{доп}), \quad (37)$$

где $k_{внеб}$ – коэффициент отчислений на уплату во внебюджетные фонды

Отчисления во внебюджетные фонды представлены в таблице 18.

Таблица 18 – Отчисления во внебюджетные фонды

Исполнитель	Основная заработная плата, руб.	Дополнительная заработная плата, руб.
Руководитель проекта	88528	11508,9
Инженер	13200	14256,6
Коэффициент отчислений во внебюджетные фонды	0,302	
Итого:	38503.7	

4.3.4.5 Накладные расходы

Величина накладных расходов определяется по следующей формуле:

$$З_{накл} = k_{нр} \cdot (\text{ссумм статей} 1 \div 7), \quad (38)$$

где $k_{нр}$ – коэффициент, учитывающий накладные расходы.

Величину коэффициента накладных расходов $k_{нр}$ допускается взять в размере 16%. Таким образом, накладные расходы на данные НТИ составляют 17748 руб.

4.3.4.6 Формирование бюджета затрат научно-исследовательского проекта

Определение бюджета затрат на научно-исследовательский проект приведён в таблице 19.

Таблица 19 – Расчёт бюджета затрат НТИ

Наименование статьи	Сумма, руб.		Примечание
	Исп.1	Исп.2	
1. Материальные затраты НТИ	0	0	-
2. Затраты на специальное оборудование для научных (экспериментальных) работ	40000	40000	Таблица 12
3. Затраты по основной заработной плате исполнителей темы	88528	13200	Таблица 14
4. Затраты по дополнительной заработной плате исполнителей темы	11508,9	14256,6	Таблица 14
5. Отчисления во внебюджетные фонды	30211,8	8291.8	Таблица 15
6. Накладные расходы	27240.1	12119.7	16 % от суммы ст. 1-5
7. Бюджет затрат НТИ	197488.8	87868.10	Сумма ст. 1-6

Можно видеть из таблицы 19 основные затраты НТИ приходятся на основную заработную плату руководителя темы.

4.4 Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования

Определение эффективности основано на расчете интегрального показателя эффективности научных исследований.

Интегральный финансовый показатель разработки определяется как:

$$I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i} = \frac{\Phi_{\text{pi}}}{\Phi_{\text{max}}}, \quad (39)$$

где $I_{\text{финр}}^{\text{исп.}i}$ – интегральный финансовый показатель разработки; Φ_{pi} – стоимость i -го варианта исполнения; Φ_{max} – максимальная стоимость исполнения научно-исследовательского проекта (в т.ч. аналоги).

Таблица 20 – Сравнительная оценка характеристик вариантов исполнения проекта

Объект исследования Критерии	Весовой коэффициент параметра	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1. Способствует росту производительности труда	0,25	5	5	3
2. Удобство в эксплуатации	0,15	4	4	3
3. Надёжность	0,20	5	5	4
4. Воспроизводимость	0,25	4	4	4
5. Материалоёмкость	0,15	5	3	4
ИТОГО	1	4,6	4,3	3,6

Таблица 21 – Сравнительная эффективность разработки

No п/п	Показатели	Исп.1	Исп.2	Исп.3
1	Интегральный финансовый показатель разработки	0,997	1	0,986
2	Интегральный показатель ресурсоэффективности разработки	4,6	4,3	3,6
3	Интегральный показатель эффективности	4,61	4,3	3,65
4	Сравнительная эффективность вариантов исполнения	1	0,93	0,97

Вывод: Сравнительный анализ интегрированных показателей эффективности показывает, что первый вариант - более эффективный вариант решения технической проблемы, поставленной в работе магистратуры с точки зрения финансовой и ресурсной эффективности, благодаря обеспечению высоких показателей реализации.

5. Социальная ответственность при исследовании тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы HDS

5.1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

Социальная ответственность или корпоративная социальная ответственность (как моральный и этический принцип) несет ответственность перед людьми и обещаниями, сделанными ими, когда организация учитывает интересы коллектива и общества, беря на себя ответственность за влияние своей деятельности на клиентов, поставщиков, сотрудники, акционеры (ISO 26000: 2011 [19]).

Данная итоговая квалификационная работа представлена исследовательской работой, в ходе которой обработка результатов анализа, составление карт и набрав на персональном компьютере, поэтому в разделе рассматривается «Производственная безопасность при работе на персональных компьютерах».

Целью настоящего раздела является анализ опасных и вредных факторов в этом виде производственной деятельности и решение вопросов обеспечения их защиты на основе требований действующих нормативных и технических документов.

Работа магистра относится к категории умственного труда и, в зависимости от степени физической силы, относится к категории легкой работы (работа выполняется сидя и не требует физического напряжения, при котором потребление энергии достигает 120 ккал / ч).

Работа проводилась на отделение экспериментальной физики школы базовой инженерной подготовки Национального исследовательского Томского политехнического университета. Для выполнения окончательной квалификационной работы по теме «Исследование тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы HDS: полосы $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ » было проведено компьютерное исследование.

5.2 Производственная безопасность

Работы на электронных компьютерах и терминалах видеодисплея проводятся в помещении, отвечающем требованиям Санитарных правил и норм (СанПиН 2.2.2 / 2.4.1340-03 [20]).

Рабочее место находится в аудитории на втором этаже здания, имеет естественное и искусственное освещение. Площадь на рабочем месте с ПК составляет не менее 6 м², а объем - не менее 20 м³. В рабочем классе есть два персональных компьютера. В номере есть системы отопления, эффективная система подачи и вытяжки. Система отопления обеспечивает постоянный и равномерный нагрев воздуха в помещении в холодный период года. Система

вентиляции обеспечивает постоянную подачу свежего воздуха. Минимальный расход воздуха составляет 50-60 м³ / час на одного работника, воздушный обмен в течение 1 часа - два-три раза (СНиП 2.04.05-91). Для выявления опасностей при работе на компьютере проводится анализ классификации опасностей в соответствии с ГОСТ 12.0.003-74 [21] (таблица 22).

Таблица 22 – Основные элементы производственного процесса камеральных работ, формирующие опасные и вредные факторы

Наименование видов работ и параметров производственного процесса	Факторы (ГОСТ 12.0.003-74 ССБТ) [21]		Нормативные документы
	Вредные	Опасные	
1	2	3	4
1. Постоянная сидячая работа в помещении за компьютером. Обработка информации на персональном компьютере (обработка базы данных; написание анализа)	1.Отклонение показателей микроклимата в помещ-ении; 2.Недостаточная освещённость рабочей зоны; 3.Монотонный режим работы; 4.Превышение уровней шума; 5.Превышение уровней электромагнитных излучений.	1.Электробезопасность	1. ГОСТ 12.1.005-88 [22] 2. СанПиН 2.2.4.548-96 [23] 3. СНиП 23-05-95 [24] 4. ГОСТ 12.1.019-79 [25] 5. ГОСТ 12.1.038-82 [26] 6. ГОСТ 12.1.004-91 [27] 7. ГОСТ 12.1.003-83 [28]

Примечание: пожароопасность в п. 5.4, как ЧС.

5.2.1 Анализ вредных производственных факторов и обоснование мероприятий по снижению воздействия

Отклонение индексов микроклимата в помещении.

Микроклиматические параметры - это сочетание температуры, относительной влажности и скорости движения воздуха. Эти параметры в значительной степени влияют на функциональную активность человека, его здоровье, его здоровье, а также надежность работы компьютерных технологий. Для создания нормальных условий для персонала установлены нормы промышленного микроклимата. В промышленных помещениях, где работа на ПЭВМ является основной, согласно СанПиН 2.2.4.548-96 [26], должны быть предоставлены оптимальные параметры микроклимата.

Занесём показатели температуры, влажности и скорости воздуха в таблицу 23.

В сезоне года будет два периода:

- Холодный. Среднесуточная температура наружного воздуха равна $+10^{\circ}\text{C}$.
- Тёплый. Среднесуточная температура наружного воздуха выше $+10^{\circ}\text{C}$.

Так как в помещении работают инженеры-программисты, то категория тяжести выполняемых работ – I_a .

Таблица 23 – Оптимальные нормы микроклимата для помещений с ВДТ и ПЭВМ (СанПиН 2.2.4.548-96 [26])

Сезонгода	Категория тяжести выполняемых работ	Температура, °С		Относительная влажность, %		Скорость движения воздуха, м/сек	
		Фактич. значение	Допуст и м. значение	Фактич. значение	Допуст и м. значение	Фактич. значение	Допуст и м. значение
1	2	3	4	5	6	7	8
Холодный	Ia	22	22-24	45	40-60	0.1	0.1
Тёплый	Ia	25	23-25				

Анализ характеристик микроклимата будем производить согласно ГОСТ 12.1.005-88 [22].

Согласно измерениям, все показатели соответствуют нормам. Для поддержания требуемой температуры, влажности и скорости воздуха в помещении используются отопление и кондиционирование воздуха.

Недостаточное освещение рабочей зоны. В помещении, где расположено рабочее место, есть естественное и искусственное освещение. Естественный свет обеспечивается через свет апертуры, ориентированный на восток и запад. Естественный свет нормализуется естественным светом (КЕО) или (е) естественным светом. Коэффициент естественной освещённости равен:

$$КЕО = \frac{E}{E_0} \cdot 100\%, \quad (40)$$

где E – освещённость (измеренная) на рабочем месте, лк; E_0 – освещённость на улице (при среднем состоянии облачности), лк. Обеспечивается коэффициент естественного освещения (КЕО) не ниже 1,5%.

Искусственное освещение разделено на общее и местное. При общем освещении светильники устанавливаются в верхней части помещения параллельно стене с оконными отверстиями, что позволяет их включать и выключать последовательно, в зависимости от изменения естественного освещения. Для выполнения таких работ, как, например, обработка документов, требуется дополнительное местное освещение, которое концентрирует световой поток непосредственно на инструментах и предметах труда. Освещение на поверхности стола в зоне размещения рабочего документа должно составлять 300-500 люкс. В области рабочего места освещение должно быть 300-500 люкс, яркость светящихся поверхностей (окон, ламп и т. Д.) В поле зрения, <200 кд / м², коэффициент пульсаций <5% СНиП 23-05 -95 [24].

Одним из методов расчета искусственного освещения является метод светового потока, который используется для определения общего равномерного освещения на горизонтальной поверхности. Световой поток от лампы накаливания или группы разрядных ламп, образующих светильник, рассчитывается по формуле:

$$\Phi_{\text{л}} = \frac{100 \cdot E_n \cdot S \cdot K \cdot Z}{N \cdot \eta}, \quad (41)$$

где $\Phi_{\text{л}}$ – световой поток лампы или группы ламп, лм; N – число светильников в помещении, шт.; E_n – нормированная минимальная освещённость, лк. S –

площадь освещаемого помещения, m^2 ; Z – коэффициент минимальной освещённости, равный отношению E_{cp}/E_{min} , значение которого для ламп накаливания составляет 1,15, а для люминесцентных ламп – 1,1; K – коэффициент запаса, составляющий для ламп накаливания 1,3-1,6 и для разрядных ламп – 1,4-1,8; U – коэффициент использования светового потока ламп. Световой поток группы ламп 2150 лк.

Недостаточное освещение приводит к напряжению зрения, ослабляет внимание, приводит к возникновению преждевременной усталости. Чрезмерно яркое освещение вызывает ослепление, раздражение и боль в глазах. Неправильное направление света на рабочем месте может создавать острые тени, блики, дезориентировать рабочего. Все эти причины могут привести к несчастному случаю или профессиональным заболеваниям, поэтому правильный расчет освещения так важен.

Расчет освещенности комнаты. Одним из методов расчета искусственного освещения является метод светового потока. Он используется для определения общего равномерного освещения на горизонтальной поверхности.

Мы вычисляем искусственное освещение в исследовании и сравниваем его с нормами освещения на рабочем месте в соответствии со СНиП 23-05-95 «Стандарты освещенности на рабочих местах производственных помещений при искусственном освещении» [24].

Данное помещение имеет следующие размеры: длина $A = 4,1$ м, ширина $B = 3$ м, высота $H = 2,5$ м. Высота рабочей поверхности $h_{rp} = 0,9$ м. Шкаф использует систему общего равномерного освещения. Светильники расположены в два ряда. В каждом ряду есть 2 лампы типа ШОД мощностью 40 Вт (с длиной 1,23 м), при этом разрывы между светильниками в ряду составляют 50 см. Изобразим схему помещения и размещения на нём светильников (Рисунок 11). Учитывая, что в каждом светильнике установлено две лампы, общее число ламп в помещении $N = 8$. В светильниках установлены люминесцентные лампы белой цветности (ЛБ) мощностью 40 Вт, работающие от сети напряжением 220 В, и обеспечивающие световой поток $\Phi = 2800$ лм.

Коэффициент отражения стен (оклеены светлыми обоями) $R_c = 50$ %, потолка (свеж побеленный) $R_n = 70$ %. Коэффициент запаса $k = 1,5$ для помещений с малым выделением пыли, коэффициент неравномерности для люминесцентных ламп принимается равным $Z = 1,1$.

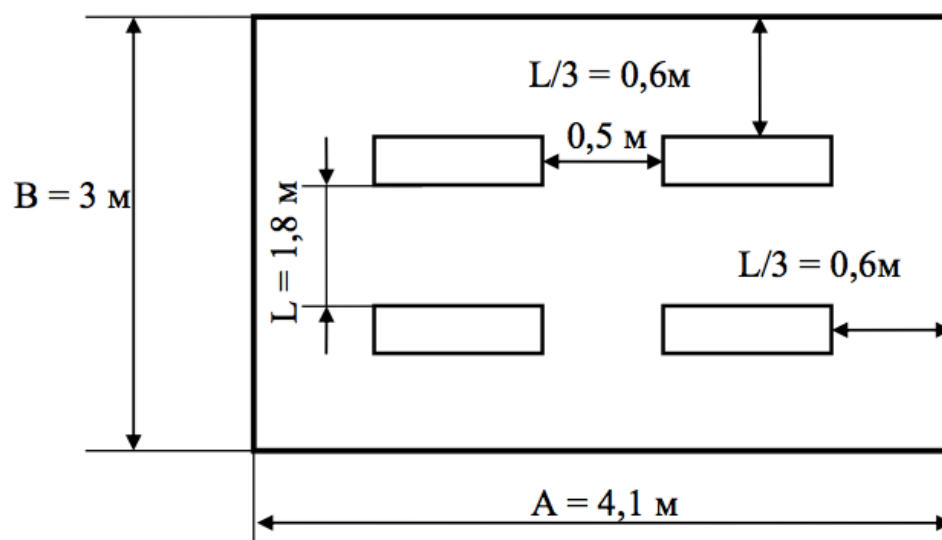


Рисунок 8 – Схема размещения светильников в помещении.

Высота светильника в среднем $h = 0,3$ м.

$$h = 1,3 \text{ м}; L = 1,8 \text{ м}; L/3 = 0,6 \text{ м}.$$

Освещённость в помещении определяется по формуле:

$$E = \frac{\Phi \cdot N \cdot \eta}{S \cdot K_s \cdot Z}, \quad (42)$$

где Φ – световой поток одной лампы, лм; S – площадь освещаемого помещения, м²; K_s – коэффициент запаса, учитывающий загрязнение светильника (источник света, осветительная арматура, стены и т. д., т. е. отражающие поверхности), наличие дыма и пыли в атмосфере магазина; Z – коэффициент неравномерности освещения; N – число ламп в помещении; η – коэффициент использования светового потока.

Коэффициент использования светового потока показывает, сколько световой поток ламп падает на рабочую поверхность. Это зависит от индекса комнаты i , типа светильника, высоты светильников над рабочей поверхностью h и коэффициентов отражения стен ρ_c и потолка ρ_n .

Находим индекс помещения:

$$i = \frac{S}{h \cdot (A+B)}, \quad (43)$$

$$i = 12,3 / (1,3(4,1+3)) = 1,33$$

Коэффициент использования светового потока: $\eta = 0,44$.

Определяем освещённость в помещении:

$$E = \frac{2800 \cdot 8 \cdot 0,44}{12,3 \cdot 1,5 \cdot 1,1} = 485,6 \text{ (лк)}$$

Согласно СНиП 23-05-95 «Нормы освещения на рабочих местах производственных помещений под искусственным освещением» [24] визуальная работа в этом зале относится к классу наивысшей точности, так как наименьший размер объекта различения на экране компьютера менее 0,15 мм (точка). Разряд зрительной работы – I, подразряд – г (контраст объекта с фоном – средний, большой; фон – светлый, средний). Для данных параметров устанавливается норма освещённости – 300-400 лк при системе общего освещения.

Из полученных нами результатов можно сделать вывод, что эта служба, с учетом выполненных в ней визуальных работ, соответствует нормам освещенности, установленным СНиП 23-05-95 [24].

Для обеспечения нормализованных значений освещенности при использовании ПК необходимо чистить оконные стекла и лампы не реже двух раз в год и своевременно заменять сожженные лампы. Для защиты от чрезмерной яркости окон можно использовать шторы и шторы.

Монотонный режим работы. Известно, что работоспособность не является постоянной, она меняется. Основной причиной изменения работоспособности является сама работа. Обычно производительность снижается с более или менее продолжительной производительностью. Снижение работоспособности под воздействием выполненной работы обычно считается усталостью. В то же время имеется много данных, указывающих на то, что в дополнение к рабочей нагрузке в реальной рабочей деятельности

определенные условия труда также зависят от неблагоприятных условий труда, в том числе от характера выполняемой работы. Таким образом, влияние на эффективность фактора монотонности широко известно.

Прикладные показатели, в первую очередь, можно разделить на «объективные» и «субъективные». Объективными показателями эффективности являются: а) изменения количественных и качественных показателей работы и б) изменения функционального состояния нервной системы. Субъективные показатели включают чувство усталости, летаргии, болезненных ощущений. Эти субъективные переживания свидетельствуют о тех психических состояниях, которые развиваются со снижением эффективности. Психическое состояние во время усталости обычно обозначается термином «усталость». В дополнение к этому состоянию в ходе трудовой деятельности могут возникать другие психические состояния, связанные с особым интересом к результатам работы или, наоборот, безразличие к ним, состояние беспокойства и т. Д. Все эти состояния также имеют отпечаток на соответствующих субъективных показателях.

Неблагоприятное влияние монотонности на производительность, конечно, проявляется во всех показателях эффективности. Имеющиеся данные показывают, что при монотонной работе наблюдается более раннее появление как объективных, так и субъективных признаков снижения эффективности.

Разница в динамике работоспособности немонотонной и монотонной работы привела к тому, что ряд исследователей пришли к выводу, что

монотонная работа развивает особое специфическое состояние, называемое монотонностью, отличное от состояния фактической усталости, со своими особыми физиологическими механизмами.

По мнению большинства исследователей, торможение, которое развивается в центральной нервной системе при усталости, является результатом перегрузки соответствующих систем головного мозга и играет защитную, защитную роль, предотвращая их чрезмерное истощение.

Чтобы избежать усталости, необходимо делать 15 минут перерывов каждые 2 часа, а также желательно попробовать более 4 часов, чтобы не заниматься одной и той же работой, необходимо изменить профессию и ситуацию.

Превышение уровня шума. Сильный шум вызывает трудности в распознавании цветовых сигналов, уменьшает скорость восприятия цвета, остроту зрения, визуальную адаптацию, нарушает восприятие визуальной информации, быстро и точно снижает способность выполнять скоординированные движения, снижает производительность на 5-12%. Длительное воздействие шума с уровнем звукового давления 90 дБ снижает производительность труда на 30-60%.

Согласно ГОСТ 12.1.003-83 [28] с изм. 1999 г. эквивалентный уровень звука не должен превышать 50 дБА.

Оборудование, которое производит вибрацию в рабочей комнате, отсутствует, поэтому эта характеристика не будет рассмотрена. Самый высокий уровень шума в рабочем кондиционере - 40 дБА.

В рабочей комнате, согласно измерениям, уровень звука составляет 25-40 дБ, в зависимости от того, работает кондиционер или нет. Соответственно, уровень звука в номере.

Для дальнейшего его уменьшения могут быть предложены следующие меры:

- применить звукопоглощающее покрытие стен;
- экранировка рабочего места;
- установка менее шумного кондиционера.

Превышение уровней электромагнитного излучения. Источники электромагнитное излучение - электрические сигналы цепей при работе компьютера. Нарушения в организме человека под воздействием электромагнитных полей малых напряжений обратимы. При воздействии на поля, которые имеют напряжение выше максимально допустимого уровня, развиваются нарушения со стороны нервной и сердечно-сосудистой систем, органов пищеварения и некоторых биологических показателей крови.

Самым мощным источником электромагнитных полей в комнате являются катушки отклоняющих систем, расположенных вблизи цокольных частей электронно-лучевых трубок мониторов.

Нормы напряженности электромагнитного поля на расстоянии 50 см вокруг монитора в соответствии с электрической составляющей, соответствующие [20], приведены в таблице 24.

Таблица 24 – Нормы напряжённости поля

Наименование параметров	Допустимые значения
Напряжённость электромагнитного поля на расстоянии 50 см. Вокруг ВДТ по электрической составляющей должна быть не более:	
- в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц	25 В/м
- в диапазоне частот 2—400 кГц	2,5 В/м
Плотность магнитного потока должна быть не более:	
- в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц	250 нТл
- в диапазоне частот 2-400 кГц	25 нТл
Поверхностный электростатический потенциал не должен превышать	500 В

Чтобы соответствовать максимально допустимой напряженности электромагнитного поля, расстояние от глаз до монитора должно составлять 60-70 см, но не менее 50 см. Увеличение расстояния в 2 раза приводит к 32-кратному уменьшению плотности мощности на низких частотах на оператора.

Последние научные достижения в области мониторов позволяют значительно снизить уровень радиации. Использование современных

ЭЛТ-мониторов и ЖК-мониторов гарантирует минимальные значения электромагнитных полей вблизи экранов (менее 10 В / м в диапазоне частот от 5 Гц до 2 кГц и менее 1 В / м в частотном диапазоне 2- 400 кГц).

5.2.2 Анализ опасных производственных факторов и обоснование мероприятий по снижению воздействия

Электричество. Электрические установки, к которым практически все компьютерное оборудование представляют большую потенциальную опасность для человека, поскольку во время работы или проведения профилактических работ человек может коснуться частей, находящихся под стрессом. Конкретная опасность электрических установок - токопроводящих проводников, корпусов компьютерных стеллажей и другого оборудования, которое оказалось напряжения в результате повреждения изоляции, не дают никаких сигналов, предупреждающих человека об опасности. Реакция человека на электрический ток происходит только тогда, когда последний проходит через тело человека.

Электрический ток является скрытым видом опасности, потому что трудно определить в токовых и неточных частях оборудования, которые являются хорошими проводниками электричества. Смертельно опасным для жизни человека считается ток, величина которого превышает 0,05 А, ток менее 0,05 А - безопасен (до 1000 В).

Для предотвращения электротравматической травмы важна правильная организация работы, соблюдение Правил технической эксплуатации бытовых электроустановок и правил безопасности для эксплуатации бытовых электроустановок (потребителей ПДЭ и ПДБ) и Правил электромонтажа (ПЭУ). Для предотвращения электрической травмы необходимо соблюдать требования к электробезопасности людей, работающих на ПЭВМ:

- все узлы одного персонального компьютера и подключённое к нему периферийное оборудование должно питаться от одной фазы электросети;
- корпуса системного блока и внешних устройств должны быть заземлены радиально с одной общей точкой;
- для отключения компьютерного оборудования должен использоваться отдельный пункт с автоматами и общим рубильником;
- все соединения ПЭВМ и внешнего оборудования должны проводиться при отключённом электропитании.

Основные мероприятия, направленные на устранение причин травмы включают:

1. систематический контроль за состоянием изоляции электропроводов, кабелей и т.д.
2. разработка инструкций по техническому обслуживанию и эксплуатации средств вычислительной техники и контроль за их соблюдением;
3. соблюдение правил противопожарной безопасности;

4. своевременное и качественное выполнение работ по проведению планово-профилактических работ и предупредительных ремонтов.

5.3. Экологическая безопасность

Под охраной окружающей среды понимается набор международных, государственных и региональных правовых актов, правил и стандартов, которые приносят общие юридические требования к каждому конкретному загрязнителю и обеспечивают его заинтересованность в удовлетворении этих требований, конкретные природоохранные меры для реализации этих требований.

Охрана окружающей природной среды складывается из:

- правовой охраны, формулирующей научные экологические принципы в виде юридических законов, обязательных для исполнения;
- материального стимулирования природоохранной деятельности, стремящегося сделать её экономически выгодной для предприятий;
- инженерной охраны, разрабатывающей природоохранную и ресурсосберегающую технологию и технику.

Основными принципами охраны окружающей среды являются:

- приоритет обеспечения благоприятных экологических условий для жизни, труда и отдыха населения;
- научно обоснованное сочетание экологических и экономических интересов общества;

- учёт законов природы и возможностей самовосстановления и самоочищения её ресурсов.

Деятельность человека наносит ущерб окружающей среде, и поэтому общество сталкивается с задачей сделать это воздействие наименее пагубным.

В процессе работы в компьютерных центрах, а также в обычной жизнедеятельности человек является источником твердых бытовых отходов. Эти отходы, как пищевые, так и промышленные, сильно загрязняют окружающую среду.

Как правило, бумага, диски, строительные отходы, коробки и т. д. Действуют как промышленные отходы. Этот мусор с другими отходами экспортируется на территории, предназначенные для хранения бытовых отходов.

Другие факторы, влияющие на окружающую среду, отсутствуют в процессе создания НИР.

5.3 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

Пожар в организации - большая опасность, так как она связана с большими материальными потерями. Огонь может начаться с взаимодействия легковоспламеняющихся веществ, источников окисления и воспламенения.

Пожар может возникнуть из-за:

- неисправные провода, розетки и переключатели, которые могут привести к короткому замыканию или поломке изоляции;
- использование в помещении электронагревателей с открытыми нагревательными элементами;
- использования повреждённых электроприборов;
- попадания молнии в здание;
- неаккуратного обращения с огнём и несоблюдения мер пожарной безопасности.

Согласно классификации производств по пожароопасности (ППБ-03), в зависимости от характеристик веществ, используемых в производстве, и их количества, помещения делятся на категории А, Б, В, Г, Д.

Данное номер относится к категории В, поскольку горючие материалы и материалы находятся в твердом состоянии без выброса пыли.

Для тушения пожара есть пожарные бочки, внутренние противопожарные водопроводные трубы, огнетушители и сухой песок.

Для тушения пожара есть пожарные бочки, внутренние противопожарные водопроводные трубы, огнетушители и сухой песок.

Вода используется для тушения пожаров в помещениях программистов только в случае опасности повреждения или полного отказа дорогостоящего оборудования. В этом случае, если это возможно, необходимо защитить компьютеры от влаги.

Пожаров широко используются для тушения пожаров на начальных этапах. Поэтому в департаментах с ПК используются огнетушители с диоксидом углерода, преимуществом которых является высокая эффективность пожаротушения и безопасность электронного оборудования.[29]

Благодаря диэлектрическим свойствам двуокиси углерода эти огнетушители могут использоваться даже в том случае, если электроинсталляция не может быть немедленно отключена.

Для предотвращения возникновения пожара проводятся специальные семинары с работниками здания, где они знакомятся с основами пожарной безопасности и обучением при работе с первичными средствами пожаротушения.

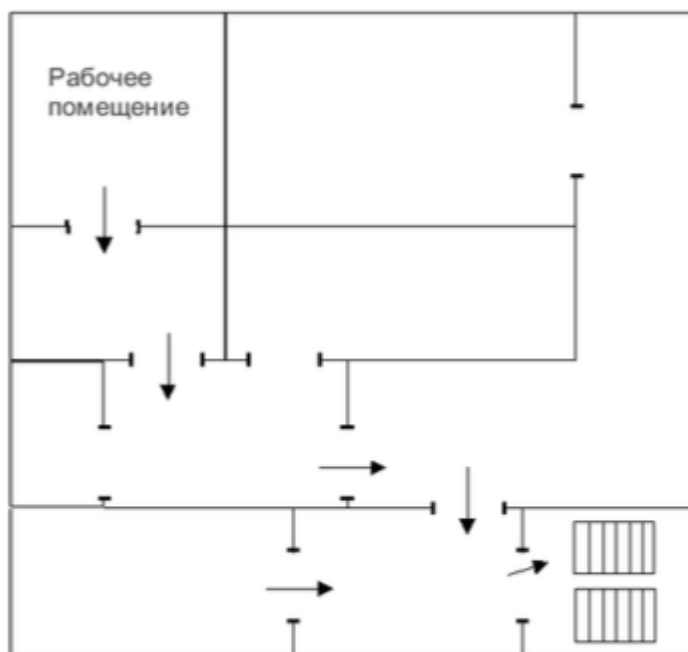


Рисунок 9 – План эвакуации

При наличии небольшого огня вы можете использовать импровизированные инструменты и самостоятельно начать огонь. В противном случае, если огонь не может быть потушен, необходимо, если это возможно, обесточить помещение, вызвать пожарную бригаду, а также, согласно плану эвакуации (Рисунок 9), вывести людей на улицу.

5.4 Заключение социальной ответственности

В этой статье мы рассматриваем безопасность и здоровье труда при изучении тонкой колебательно-вращательной структуры спектра поглощения молекулы HDS: полосы $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$. Были выявлены вредные и опасные факторы рабочей зоны, причины и средства защиты, рассмотрены чрезвычайные ситуации и поведение в них.

Социальная ответственность представляет собой диалектическую связь между человеком (работодателем) и обществом (работником), характеризующимся взаимными правами и обязанностями по выполнению социальных норм и налагающим влияние в случае его нарушения. Основываясь на соображениях безопасности при выполнении работы, было ясно, что студенты - будущий лидер - должны нести социальную ответственность за принятые решения.

Заключение

В данной работе было проведено исследование колебательно-вращательных полос $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ молекулы HD^{34}S . В результате анализа колебательно-вращательной структуры полос $\nu_1+\nu_2$ и $\nu_2+\nu_3$ молекулы HD^{34}S на основе метода комбинационных разностей было получено около 1200 энергетических переходов, соответствующие 333 энергиям верхнего колебательного состояния. Максимальные значения квантовых чисел составили $J^{max} = 20$ $K_a^{max} = 9$ для полосы $\nu_1+\nu_2$ и $J^{max} = 16$ $K_a^{max} = 10$ для полосы $\nu_2+\nu_3$.

На основе полученной из экспериментального спектра информации, была осуществлена процедура варьирования параметров эффективного гамильтониана. В результате были получены наборы из 14 параметров, которые воспроизводит исходные колебательно-вращательные энергии со среднеквадратичным отклонением - $1,5 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ и $7,6 \times 10^{-5} \text{ см}^{-1}$ для полос $\nu_1 + \nu_2$ и $\nu_2 + \nu_3$ соответственно.

Список литература:

1. Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг. – Москва: ИЛ, 1965. – 648 с.
2. Новая генерация [Электронный ресурс]. URL: https://manbw.ru/analytics/hydrogen_sulfide_h2s.html (дата обращения: 04.05.2020)
3. Пат. 0002540670 Российская Федерация, В 01 J 20/06. Сорбент для очистки нефтяных газов от сероводорода и способ его получения/ Скороходова Т. С. , Можайко В. Н., Коботаева Н. С.; заявитель и патентообладатель Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт химии нефти Сибирского отделения Российской академии наук (ИХН СО РАН). – № 2013146781/05; заявл. 18. 10. 2013; опубл. 02. 10. 2015; Бюл. № 4.–7 с.
4. Self S. The possible effects of large 19th and 20th century volcanic eruptions on Zonal and hemispheric surface temperatures/ S. Self, M. R. Rampino, J.J. Barbera // J. Volcanol. Geotherm. Res. –1981 –Vol.11. – P.41 – 60.
5. Farquhar J. Atmospheric influence of earth' s earliest sulfur cycle/ J. Farquhar, H. Bao, M. Thiemens// Science – 2000. – Vol.289. – P. 756 – 758.
6. Minh Y.C. Observations of the H₂S toward OMC–1./ Y.C. Minh, L.M. Ziurys, W.M. Irvine, D. McGonagle // Astrophys. J. –1990. – Vol. 360. – P. 136 – 141
7. Hund F. On the explanation of molecular spectra. I. // Zeitschrift fur Physik/ – 1926. – Vol. 40. - № 10. – P. 742 – 764.
8. Давыдов А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов. – М.: Наука,

1975. – С. 703

9. Макушкин Ю. С. Симметрия и ее применение к задачам колебательно-вращательной спектроскопии молекул. Часть 2/ Ю. С. Макушкин, О. Н. Улеников, А. Е. Чеглоков. – Томск: Издательство ТГУ, 1990. – 248 с.

10. C. Camy-Peyret, J.-M.Flaud, L.Lechuga-Fossat, J.W.C.Johns. The far-infrared spectrum of deuterated hydrogen sulfide: The ground state rotational constants of D₂32S, D₂34S, HD₃2S, and HD₃4S // Journal of Molecular Spectroscopy – 1985. – V.109. – p. 300-333.

11. Ulenikov O.N., Tolchenov R.N., Koivusaari M., Alanko S., Antilla R. High Resolution Study of Deuterated Hydrogen Sulfide in the Region 2400-3000 cm⁻¹ // Journal of Molecular Spectroscopy – 1995. – V.170. – p. 397-416.

12. Vladimir G. Tyuterev, Sergei A.Tashkun, David W.Schwenke An accurate isotopically invariant potential function of the hydrogen sulphide molecule // Chemical Physics Letters – 2001. – V. 348. – p. 223–234.

13. E. R. Polovtseva, N. A. Lavrentiev, S. S. Voronina, O. V. Naumenko, A. Z. Fazliev Information system for molecular spectroscopy. 5. Ro-vibrational transitions and energy levels of the hydrogen sulfide molecule // Atmospheric and Oceanic Optics. – 2012. – V.25. – p.157-165

14. A. Yu. Akhlestin, S. S. Voronina, O. V. Naumenko, E. R. Polovtseva, A. Z. Fazliev Information system for molecular spectroscopy: 6—systematization of spectral data on deuterio-substituted isotopologues of the hydrogen sulfide molecule // Atmospheric and Oceanic Optics. – 2017. – V.30. – p.134-143

15. Любарский Г.Я. Теория групп и физика. Изд. 2. URSS. 2014. 232 с. ISBN 978-5-9710-1138-5.
16. Ефимова А.И. Инфракрасная Фурье-спектроскопия: Учебное пособие/ А.И. Ефимова, В.Б. Зайцев, Н.Ю. Болдырев, П.К. Кашкаров. – М.: Физический факультет МГУ, 2008. – 133 с.
17. Watson. J.K.G. Determination of centrifugal coefficients of asymmetric – top molecules // J. Chem. Phys. – 1967. –V. 46 – pp.1935-1949
18. Видяев И.Г., Серикова Г.Н., Гаврикова Н.А., Шаповалова Н.В., Тухватулина Л.Р., Креницына З. В. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение: учебно-методическое пособие. Томск: Издательство Томского политехнического университета, 2014, 36 с.
19. ISO 26000:2011 Социальная ответственность организации.
20. СанПиН 2.2.2/2.4.1340-03 Гигиенические требования к персональным электронно-вычислительным машинам и организации работы.
21. ГОСТ 12.0.003-74. ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.
22. ГОСТ 12.1.005-88 (с изм. №1 от 2000 г.). ССБТ. Общие санитарно-гигиенические требования к воздуху рабочей зоны (01. 01. 89).
23. СанПиН 2.2.4.548-96. Гигиенические требования к микроклимату производственных помещений.
24. СНиП 23-05-95. Естественное и искусственное освещение.

25. ГОСТ 12.1.019-79. ССБТ. Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
26. ГОСТ 12.1.038-82. ССБТ. Электробезопасность. Предельно допустимые уровни напряжений прикосновения и токов.
27. ГОСТ 12.1.004-91. ССБТ. Пожарная безопасность. Общие требования.
28. ГОСТ 12.1.003-83 ССБТ. Шум. Общие требования (01. 07. 92).
29. Жуков, Виктор Ильич. Защита и безопасность в чрезвычайных ситуациях : учебное пособие / В. И. Жуков, Л. Н. Горбунова; Сибирский федеральный университет (СФУ). — Москва; Красноярск: Инфра-М Изд-во СФУ, 2014. — 392 с.: ил. — Высшее образование. Бакалавриат. — Библиогр.: с. 384- 387.

Analysis of the Ro-vibrational Vertical Spectrum of High Resolution in the Bands $\nu_1+\nu_2$ and $2\nu_1$ of Hydrogen Sulfide

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
ОБМ81	Чжоу Синьтун		

Руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор ИШ ФВП	Бехтерева Е.С.	д.ф.-м.н.		

Консультант-лингвист отделения иностранных языков ШБИП

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Утятина Я.В.			

CONTENTS

Introduction	99
1. Literature Review	101
1.1 Electronic-vibrational-rotational Hamiltonian of a Nonlinear Molecule.....	101
1.2 Effective Isolated State Hamiltonian	103
2. The results of the Study	108
2.1 Experiment Details	108
2.2 Solution of the inverse spectroscopic problem	112

Introduction

With the increasing application of astrophysics and planetary research, the demand for laboratory research in the field of high-resolution molecular spectroscopy is also increasing. In fact, vibration-rotation spectroscopy makes it possible to obtain accurate information about the internal structure of molecules. Using the interpretation of the spectrum, scientists can determine the main characteristics of the molecule, including various properties of the molecule.

The interpretation of the spectrum makes it possible to determine the energy level system of the molecule and find the spectral constants, structural parameters and potential energy of the molecule under study [1]. This information is indispensable for solving many application problems in the fields of planetary science, atmospheric optics, and astrophysics.

The relevance of the work is in following. This study allows to determine the mentioned characteristics of the molecule and make it possible to improve the calculation of the potential function of the main modification of hydrogen sulfide in the future. From [2] - [3], we know that hydrogen sulfide is considered as a valuable chemical raw material: it is possible to obtain a significant amount of organic and inorganic compounds from hydrogen sulfide. In addition, hydrogen sulfide is one of the pollutants in the atmosphere and, therefore, there is a need to develop techniques to purify gas from hydrogen sulfide impurities and, as a result, reduce emissions into the atmosphere. Gas purification from hydrogen sulfide is regulated not only by the requirements of the sanitary-hygienic order, but also by production necessity: to

protect the apparatus and equipment from corrosion during transportation, processing and use of gas; to obtain, by processing purified gases, products of proper quality without impurities of sulfur compounds; have in some cases the economic benefit of extracting elemental sulfur.

In addition, the volatile components of hydrogen sulfide play an important role in the formation and eruption of magma and in the combustion of fuel in human activities [4]. Therefore, the molecule is very interesting in studying of the earth's atmosphere. Various isotopes of hydrogen sulfide provide a basis for studying processes that occurred in the early history of the Earth [5]. As we all know, hydrogen sulfide exists in the atmosphere of solar gas giants, comets, brown dwarfs, and interstellar clouds [6]. Therefore, to determine the composition of these space objects, the characteristic conditions of celestial bodies have scientific significance. In this research the analysis of high-resolution spectra in large spectral ranges (the infrared region) was done.

Therefore, in this study, it is assumed that the obtained results can be useful for solving the above mentioned problems.

1. Literature Review

1.1 Electronic-vibrational-rotational Hamiltonian of a Nonlinear Molecule

It is known that the solution of the Schrödinger equation directly depends on the form in which the Hamiltonian of the molecule H is selected. Therefore, the task of constructing the Hamiltonian of the molecule is no less important than solving the Schrödinger equation.

From a physical point of view, a molecule is a system consisting of nuclei of atoms and electrons. Therefore, the Hamiltonian used to solve the Schrödinger equation must also take into account the coordinates and spins of all the particles that make up the molecule. In addition, the equation should take into account all types of interactions between these particles. The construction of such a Hamiltonian is a rather laborious process. The real way to a theoretical description of the spectrum of molecules is to use various types of approximations in the construction of the Hamiltonian of molecules.

In molecular spectroscopy, relativistic effects are neglected and, as a rule, the Hamiltonians of the following form are used [9]:

$$H = T_{nuc} + T_{el} + V \quad (1)$$

where T_{nuc} and T_{el} – kinetic energy operators of nuclei and electrons; V – operator of the potential energy of the molecule. This operator takes into account the energy of

the Coulomb attraction of electrons to nuclei and the energy of electron and internuclear repulsion. Therefore, form of the T_{nuc} , T_{el} and V operator:

$$\begin{aligned} T_{\text{яд}} &= \frac{-\hbar^2}{2} \sum_N \frac{1}{m_N} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_N^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_N^2} \right), \\ T_{\text{эл}} &= \frac{-\hbar^2}{2m_e} \sum_i \left(\frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right), \\ V &= \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} + \sum_{\substack{N,N' \\ N>N'}} \frac{z_N z_{N'}}{r_{NN'}} - \sum_{i,N} \frac{e z_N}{r_{iN}}. \end{aligned} \quad (2)$$

where m_N and m_e – masses of nuclei and electrons; z_N and e – charges of nuclei and electron; $r_{ab} = [(x_a - x_b)^2 + (y_a - y_b)^2 + (z_a - z_b)^2]^{1/2}$ – distance between the a-th and b-th particles; x_N, x_i – coordinates of electrons and nuclei in a Cartesian spatially fixed system.

The essence of the transformation is as follows. The Hamiltonian of the molecule is a function of the system of generalized coordinates x_n and derivatives with respect to $\partial/\partial x_n$. If the law of transformation of coordinates and their derivatives is known, we can find a new generalized coordinate system q_m [9]:

$$x_n = f_n(q_m), \partial/\partial x_n = \Phi_n(q_m, \partial/\partial q_l). \quad (3)$$

As it is known, if the transformation (3) is nonsingular, the Jacobian of the transformation $D(x_1, \dots, x_n)/D(q_1, \dots, q_n)$ is nonzero, then it is always possible to determine relations of the type (3) for derivatives and express old coordinates as functions of new ones. To determine the derivatives $\partial/\partial x_n$, it is necessary to find the inverse matrix to the matrix $\partial/\partial q_m$, which in some cases is a difficult task.

In the work, formulas of type (3) are determined from the following considerations. Suppose that the coordinates x_n (and therefore q_m) are a function of some parameter t (for example, time).

Then it can be shown that formulas (3) expressing derivatives $\partial/\partial x_n$ (or, up to a factor - $i\hbar$ momentum operators - $i\hbar \partial/\partial x_n$) through derivatives $\partial/\partial q_m$ (operator \mathbf{P}_m) and coordinates q_m , have exactly the same form as formulas expressing classical quantities p_{x_n} in terms of q_m and p_{q_m} . Here

$$P_{x_n} = \partial L / \partial \dot{x}_n, \quad (4)$$

$$p_{q_m} = \partial L / \partial \dot{q}_m, \quad (5)$$

$$\dot{x}_n = dx_n / dt,$$

$$\dot{q}_m = dq_m / dt, \quad (6)$$

and L – arbitrary generally polynomial of variables \dot{x}_n (or \dot{q}_m):

$$L = \sum_{i \dots j} a_{i \dots j}(x_n) \dot{x}_i \cdot \dots \cdot \dot{x}_j + \dots + \sum_i a_i(x_n) \dot{x}_i + a(x_n). \quad (7)$$

1.2 Effective Isolated State Hamiltonian

The essence of the presented method can be expressed as follows. The solution of the Schrödinger equation with the original Hamiltonian H is so complicated that it requires the use of some special techniques to greatly facilitate the search for a solution. Applying successive transformations, the Hamiltonian H' is constructed, which is similar to the original, but significantly reduced. During the transformation, a number of conditions must be fulfilled, among which the following are key.

The solution of the Schrödinger equation with this new operator can be obtained in explicit form. The set of all solutions of the Schrödinger equation with the operator H' is consistent with some subset of the set of all solutions of the Schrödinger equation with the original operator H .

Operator H' satisfying these requirements is called efficient.

Mathematically, the problem of constructing an effective Hamiltonian $\tilde{H}_{\alpha_0\alpha_0}$ state $|\alpha_0\rangle = 0$ is described as follows.

When $\tilde{H}_{\alpha\phi\phi}$ it degenerates into one operator \tilde{H}_{00} , two conditions are satisfied:

$$\begin{aligned}\langle 0|\tilde{H}|\alpha\rangle &\equiv \langle 0|G^+HG|\alpha\rangle = 0 \\ \langle \alpha|\tilde{H}|0\rangle &\equiv \langle \alpha|G^+HG|0\rangle = 0\end{aligned}\tag{8}$$

here G is an arbitrary unitary operator.

The operator \tilde{H} is built as

$$\tilde{H} = G^+HG\tag{9}$$

where G is an arbitrary unitary operator. The spectrum of eigenvalues of the operator does not change during a unitary transformation. In order to select the operator G in the form (10), it is necessary that the operator $(G-1)$ becomes small compared to the unit operator.

$$G = \exp(i \sum_{n=1}^{\infty} g_n(x^n))\tag{10}$$

where $g_n = g_n(a,b)$ — small hermitian order operators x^n .

We choose the operator G so that all elements of type $\langle \alpha^0|H'|\beta^0\rangle$ or $\langle \alpha'|H'|\beta^0\rangle$ are vanished.

$$\langle \alpha | H | \beta \rangle = \begin{pmatrix} & 0 & 0 & \dots \\ \tilde{H}_{\phi\phi} & \dots & \dots & \dots \\ & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & x & x & \dots \end{pmatrix} \quad (11)$$

Conditions (17) are the equations used to determine the operator G . If the system of equations (15) has a solution, then we can construct an effective operator. Moreover, in accordance with the definition, the operator \tilde{H}_{00} will be this effective operator

$$\tilde{H}_{00} = \langle 0 | \tilde{H} | 0 \rangle \equiv \langle 0 | G^+ H G | 0 \rangle \quad (12)$$

Under condition (1), the functions $G|0\rangle|A\rangle$, where $|0\rangle$ - eigenfunctions of the operator H_0 , and $|A\rangle$ the eigenfunctions of the original operator H . First we note that relations (16) and (17) can be combined as follows:

$$\begin{aligned} \langle 0 | \tilde{H} - H_0 | \alpha \rangle &= 0 \\ \langle \alpha | \tilde{H} - H_0 | 0 \rangle &= 0 \end{aligned} \quad (13)$$

where α is any (including $\alpha = 0$) of the eigenfunctions of the operator $H_0(\alpha)$. H_0 does not depend on the coordinates α by virtue of condition (9).

We define an operator G satisfying relations (8). This operator can be considered given if all its operator matrix elements $\langle \alpha | G | \beta \rangle$ on the eigenfunctions of the operator H_0 of the initial approximation are known. On the other hand, the operator G will be given if we determine the values $\langle \alpha | g_n | \beta \rangle$ for arbitrary values of the functions $\langle \alpha |$ and $|\beta \rangle$.

In order to determine these quantities $\langle \alpha | g_n | \beta \rangle$, we substitute (9) into (8) and use the Hausdorff formula, which allows us to write the operator exponent (10) in the form of a series

$$G = 1 + i \sum_{n=1}^{\infty} g_n + \frac{1}{2} (i \sum_{n=1}^{\infty} g_n)^2 + \dots \quad (14)$$

As a result, we obtain for $\alpha \neq 0$

$$\langle \alpha | h + [H_0, i g_1] | 0 \rangle = 0$$

$$\left\langle \alpha \left| [h, i g_1] + \frac{1}{2} [[H_0, i g_1], i g_1] + [H_0, i g_2] \right| 0 \right\rangle = 0$$

$$\left\langle \alpha \left| \begin{aligned} &[h, i g_2] + [H_0, i g_3] + \frac{1}{2} [h, i g_1], i g_1 + \frac{1}{2} [[H_0, i g_2], i g_1] + \\ &\frac{1}{2} [[H_0, i g_1], i g_2] + \frac{1}{6} [[H_0, i g_1], i g_1], i g_1 \end{aligned} \right| 0 \right\rangle = 0$$

and so on.

We used

$$\begin{aligned} &\left[1 - i g_1 - i g_2 - i g_3 + \frac{1}{2} (i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) - \frac{1}{6} (i g_1 + i g_2 + \right. \\ &\quad \left. i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) \right] (H_0 + h) \left[1 + i g_1 + i g_2 + i g_3 + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2} (i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) - \frac{1}{6} (i g_1 + i g_2 + i g_3)(i g_1 + i g_2 + \right. \\ &\quad \left. i g_3)(i g_1 + i g_2 + i g_3) \right] \end{aligned} \quad (15)$$

The HD³⁴S molecule belongs to the C_s symmetry group and is an asymmetric top molecule with three normal vibrations. Let us consider separately the transition from the ground state to the state (011), i.e. when the second and third oscillations ν_2 and ν_3 are excited. Given the conditions on unitary operators, we find the explicit

form of the matrix element $\langle 011 | ig_n | \alpha \rangle$. We systematize formula (16) in order of smallness. For the first order of smallness, the equation takes the form:

$$\langle 011 | \left[H_0 | \beta \rangle \langle \beta | ig_1 | \alpha \rangle + \langle 011 | h | \alpha \rangle - \sum_{\gamma} ig_1 | \gamma \rangle \langle \gamma | H_0 | \alpha \rangle \right] = 0$$

For second order:

$$\langle (011) | \left[1 * H_0 * ig_2 + 1 * h * ig_1 - ig_1 * H_0 * ig_1 - ig_1 * h * 1 - ig_2 * H_0 * 1 + \right. \\ \left. + 1 * H_0 * \frac{1}{2} (ig_1)^2 \right] | \alpha \rangle$$

and

$$\langle 011 | ig_1 | \alpha \rangle = \frac{\langle 011 | h | \alpha \rangle}{\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{010}}$$

$$\langle 011 | ig_2 | \alpha \rangle = \sum_{\beta} \frac{\langle 011 | ig_1 | \beta \rangle \langle \beta | h | \alpha \rangle - \langle 011 | h | 011 \rangle \langle 011 | ig_1 | \alpha \rangle}{(\varepsilon_{010} - \varepsilon_{\alpha})^2}$$

2. The results of the Study

2.1 Experiment Details

The experimental spectrum in the region of the absorption bands $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ (from 2000 to 4000 cm^{-1}) was recorded on a Bruker IFS120 HR Fourier spectrometer at the University of Braunschweig (Germany).

Table 1 - Experimental conditions.

Spectrum	Range, cm^{-1}	Pressure, mbar	Optical length, m
1	1600 - 4200	6,0	12
2	1750 - 4200	4,0	163

Figure 1 shows the recorded high-resolution spectrum of the HD^{34}S molecule in the studied range.

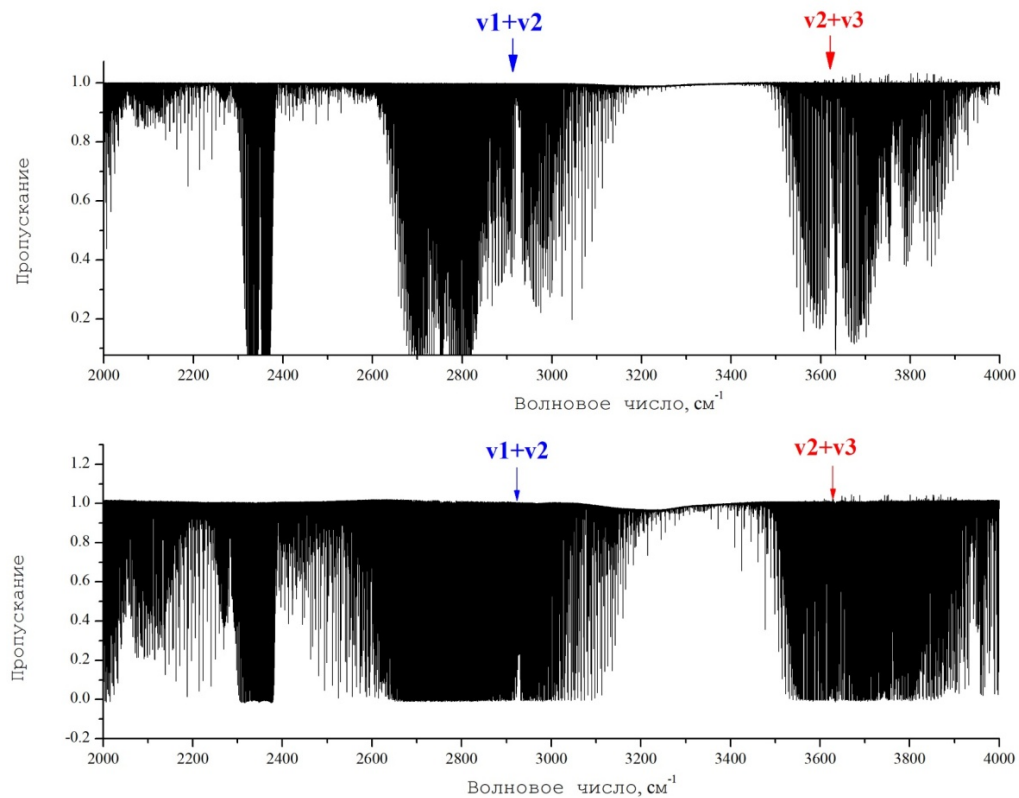


Figure 1 - Spectrum of the $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ bands of the HD^{34}S molecule.

2.2 Interpretation of experimental spectra

The bands $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ with centers 2920.6597 and $3631.0006 \text{ cm}^{-1}$, respectively, are located in the studied spectral range. The following selection rules were used for spectrum analysis : $\Delta J = 0, \pm 1$; $\Delta K_a = \pm 1$.

The vibrational-rotational structure of the bands $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$ is analyzed based on the method of combination differences. Statistical information on the results of the study are shown in table 2.

Table 2 - Statistical information

Band	$\nu_1 + \nu_2$	$\nu_2 + \nu_3$
J^{\max}	20	16
K_a^{\max}	9	10
Number of the upper levels	149	184
Number of the transitions	670	523

Part of the specific energies of the upper excited state ($\nu_1=\nu_2=1$) are presented in table 3, and for ($\nu_2=\nu_3=1$) in table 4.

Table 3 - Part of the specific energies of the upper excited state ($\nu_1=\nu_2=1$).

J	K_a	K_c	$E(110)$
1	0	1	2920.65990
1	1	1	2933.79650
2	0	2	2944.43025
2	1	2	2948.13335
3	0	3	2967.15261
3	1	3	2969.41925
4	0	4	2996.26934
4	1	4	2997.45700
5	0	5	3031.51234
5	1	5	3032.06863
6	0	6	3072.87619
6	1	6	3073.11673
7	0	7	3120.41925
7	1	7	3120.51783
8	0	8	3174.18310
8	1	8	3174.22217
9	0	9	3234.18815

9	1	9	3234.20356
10	0	10	3300.44004
10	1	10	3300.44598
11	0	11	3372.93391
11	1	11	3372.93412
12	0	12	3451.66575
12	1	12	3451.66575
2	1	1	2953.41396
3	1	2	2979.92307
4	1	3	3014.68045
5	1	4	3057.05985
7	1	6	3161.71672
8	1	7	3223.07256
9	1	8	3290.37512
10	1	9	3363.72644

Table 4 - Part of certain energies of the upper excited state ($v_2=v_3=1$).

J	K_a	K_c	E (011)
1	0	1	3639.16524
1	1	1	3643.85805
2	0	2	3655.04644
2	1	2	3658.33326
3	0	3	3677.89049
3	1	3	3679.78044
4	0	4	3707.07182
4	1	4	3707.99457
5	0	5	3742.37596
5	1	5	3742.77515
6	0	6	3783.83216
6	1	6	3783.99208
7	0	7	3831.50643
7	1	7	3831.56670

8	0	8	3885.43213
8	1	8	3885.45409
9	0	9	3945.62758
9	1	9	3945.63160
10	0	10	4012.09250
10	1	10	4012.09016
11	0	11	4084.82122
11	1	11	4084.82122
12	0	12	4163.80441
12	1	12	4163.80441
2	1	1	3663.89356
3	1	2	3690.83621
4	1	3	3726.05121
5	1	4	3768.79172
7	1	6	3873.67837
8	1	7	3935.09036
9	1	8	4002.48409
10	1	9	4076.00665

2.2 Solution of the inverse spectroscopic problem

The obtained values of energy levels for each of the bands were used in the fitting procedure of the effective Hamiltonian parameters. As a result of the fitting, 14 parameters were determined for each state. The sets of parameters are presented in tables 5 and 6. These parameters describe the initial data with an accuracy comparable to the experimental one - $1.5 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ and $7.6 \times 10^{-5} \text{ cm}^{-1}$ for the bands $\nu_1 + \nu_2$ and $\nu_2 + \nu_3$, respectively. In tables 5 and 6, the values in brackets contain information on the 1σ statistical confidence interval.

Table 5 - Spectroscopic parameters of the effective Hamiltonian ($\nu_1=\nu_2=1$) state of the HD^{34}S molecule

Parameters	$\nu_1 + \nu_2$
E	2920,65970(12)
A	9,993398(13)
B	4,908103(16)
C	3,143814(13)
$\Delta_K \times 10^4$	-3,2351(58)
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	10,4133(65)
$\Delta_J \times 10^4$	0,9694(17)
$\delta_K \times 10^4$	8.222(12)
$\delta_J \times 10^4$	0.3379(12)
$H_K \times 10^6$	0.713(17)
$H_{KJ} \times 10^6$	-1.023(24)
$H_{JK} \times 10^6$	0.5940(82)
$H_J \times 10^6$	0.00218(98)
$h_K \times 10^6$	1.527(37)

Table 6 - Spectroscopic parameters of the effective state Hamiltonian ($\nu_2=\nu_3=1$) of the HD^{34}S molecule

Параметры	$\nu_2 + \nu_3$
-----------	-----------------

E	3630,99925(24)
A	9,705330(34)
B	5,012821(22)
C	3,1538151(98)
$\Delta_K \times 10^4$	-3.291(11)
$\Delta_{KJ} \times 10^4$	10.3811(31)
$\Delta_J \times 10^4$	0.9966(15)
$\delta_K \times 10^4$	8.1453(71)
$\delta_J \times 10^4$	0.35292(88)
$H_K \times 10^6$	0.9100(89)
$H_{KJ} \times 10^6$	-1.2446
$H_{JK} \times 10^6$	0.6568
$H_J \times 10^6$	0.00506(77)
$h_K \times 10^6$	1.551(16)

Comparing the values of the parameters of the ground state with the corresponding values of the parameters of the states ($v_1=v_2=1$) and ($v_2=v_3=1$), we can see that the values do not differ from each other by more than a few %, which corresponds to the general vibrational-rotational theory [17] and proofs the physical validity of the results.